

**Möglichkeiten der Nutzung thermal-infraroter Wellenlängen zur
fernerkundlichen Erfassung/Quantifizierung von
Bodenparametern in semiariden Agrarregionen – eine
vergleichende Studie der spektralen Bereiche des LWIR und des
VNIR-SWIR auf der Basis von Labormessungen**

DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades

doctor rerum naturalium

im Fach Geographie

eingereicht an der

Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät II
der Humboldt-Universität zu Berlin

von

Dipl. Geograph Andreas Eisele

Präsident der Humboldt-Universität zu Berlin:
Prof. Dr. Jan-Hendrik Olbertz

Dekan der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät II:
Prof. Dr. Elmar Kulke

Gutachter:

1. Prof. Dr. Patrick Hostert
2. Prof. Dr. Hermann Kaufmann
3. Prof. Dr. Thomas Udelhoven

Tag der Verteidigung: 10. Februar 2014

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit werden die Möglichkeiten einer Nutzung thermal-infraroter Wellenlängen zur fernerkundlichen Erfassung/Quantifizierung von Bodenparametern vorgestellt. Die Studie basiert auf Bodenproben des Untersuchungsgebietes Mullewa, welches sich in einer semiariden Agrarregion im West-Australischen Weizengürtel befindet. Im Mittelpunkt der Arbeit steht die Bewertung des langwelligen Infrarots (*LWIR*), innerhalb des atmosphärischen Fensters zwischen 8 und 14 μm , bezüglich seines spektralen Potentials für die quantitative Ableitung des Ton- und Sandgehaltes sowie des Gehaltes an organischem Kohlenstoff (SOC). Zur Abschätzung der Effizienz wurden die Ergebnisse des *LWIR* einer Quantifizierung aus dem herkömmlich gebrauchten solar-reflektiven Wellenlängenbereichs zwischen 0,4 und 2,5 μm (*VNIR-SWIR*) gegenübergestellt.

Die Agrarregionen der Trockengebiete sind aufgrund ihrer natürlichen Bodeneigenschaften besonders gefährdet für Desertifikations-Prozesse, wie etwa der Erosion durch Wind. Die Widerstandsfähigkeit dieser Böden ist wegen des grob texturierten Charakters sowie des geringen Gehaltes an organischem Material stark eingeschränkt. Eine intensive, nicht nachhaltige Nutzung als Folge der Maximierung der landwirtschaftlichen Produktion sowie zusätzlicher Druck durch Klimaveränderungen verschärfen die Vulnerabilität dieser Ökosysteme und beschleunigen dadurch die Desertifikation. Die ausgedehnten Agrarflächen in Mullewa werden alljährlich während der Trockenzeit (Brachzeit) durch die Einwirkung von Winderosion ihres nährstoffreichen und feinkörnigen Bodenmaterials beraubt. Die hier quantifizierten Bodenparameter steuern maßgeblich die Oberflächenstabilität dieser Böden (neben der Oberflächenrauigkeit und der Bodenfeuchte). Für zukünftige *Monitoring*-Konzepte mit dem Ziel, regelmäßig den Erosionszustand landwirtschaftlicher Flächen in Trockengebieten einzuschätzen, werden diese Bodenparameter wichtige Eingangsgrößen darstellen.

Mit verschiedenen Methoden der Laborspektroskopie wurden Bodenproben aus dem Untersuchungsgebiet im thermalen (Emissions-FTIR-Spektroskopie und direktional-hemisphärische Reflexions- (DHR) Spektroskopie) und im solar-reflektiven (Diffuse Reflexions-Spektroskopie) Wellenlängenbereich eingemessen und anschließend auf ihren Informationsgehalt hin untersucht. Die quantitative Modellierung der pedologischen Parameter aus den gemessenen spektralen Signaturen wurde mithilfe einer multivariaten Regressionsanalyse (*Partial Least Squares Regression* – *PLSR*) realisiert. In einer spektralen Interpretation der PLSR-Modelle wurden diejenigen spektralen Bänder identifiziert, welche die Quantifizierung am stärksten beeinflusst haben. Dabei konnten die den Modellen zugrunde liegenden spektralen *Driver* (z.B.: Quarz, Hämatit, Korngröße, etc.) bestimmt und deren Zusammenhänge mit den quantifizierten Bodenparameter bewertet werden.

Diese Grundlagenstudie konnte zeigen, dass die spektralen Voraussetzungen im *LWIR* für ein mögliches *Monitoring* der Bodenparameter mit thermalen Fernerkundungsdaten gegeben sind. Die Arbeit demonstriert darüber hinaus, dass für die Erfassung/Quantifizierung der Texturparameter (Sand- und Tongehalt) der relevante spektrale Informationsgehalt im *LWIR* deutlich höher ist als im *VNIR-SWIR*. Für die überzeugende Leistungsfähigkeit des *LWIR* wurde die Vielfalt seiner spektralen Merkmale verantwortlich gemacht, sowohl für die Minerale Quarz und Kaolinit als auch für die Abhängigkeit von der Korngröße. Die Ergebnisse der quantitativen Modellierung machten zudem deutlich, dass der Spektralbereich des *VNIR-SWIR* bei Anwendungen in Trockengebieten wegen der charakteristischen pedologischen Eigenschaften an seine Grenzen stößt. Quarz (SiO_2), als das dominierende Mineral in semiariden Böden, besitzt im *VNIR-SWIR* keinerlei spezifische spektrale Eigenschaften und ist daher auch nicht in der Lage,

dort seine Korngrößenabhängigkeit zum Ausdruck zu bringen. Außerdem werden semiaride Böden im *VNIR* in der Regel stark von eisenhaltigen Oxiden und Hydroxiden beeinflusst, welche die spektralen Merkmale andere Bodeneigenschaften überdecken können. Die spektrale Interpretation der PLSR-Modelle veranschaulichte für die Böden aus Mullewa, dass deren Spektren im *VNIR* bis $\sim 1,3 \mu\text{m}$ vom Einfluss der eisenhaltigen Minerale Hämatit und Goethit dominiert wurden. Der hohe spektrale Kontrast, den diese Eisenoxide/-hydroxide dort erzeugten, führte in den PLSR-Modellen dazu, dass der Bereich bis $\sim 1,3 \mu\text{m}$ den eigentlich textur-relevanten Wellenlängen im *SWIR* (wie um das Kaolinit-Feature bei $2,2 \mu\text{m}$) vorgezogen wurde.

Im *LWIR* dagegen erzeugten die molekularen Fundamental-Schwingungen der Si-O Bindungen von Quarz Reststrahlenbänder mit hohem spektralen Kontrast. Quarz offenbarte die charakteristische Emissivitäts-Doppelbande zwischen 8 und $9,5 \mu\text{m}$ und Kaolinit zeigte im *LWIR* vier distinktive spektrale Merkmale ($9,0 \mu\text{m}$, $9,8 \mu\text{m}$, $10,5 \mu\text{m}$ und $10,95 \mu\text{m}$). Innerhalb der Reststrahlenbänder zeigte sich eine klare Abhängigkeit von der Korngröße, die sowohl Mineral-Feature von Quarz als auch von Kaolinit einschloss. Darüber hinaus profitierte die quantitative Modellierung der Textur-Parameter im *LWIR* zusätzlich von der Wirkung des Transparenz-Features, welches als Folge der Volumenstreuung die Bodenspektren ab $\sim 9,8 \mu\text{m}$ korngrößenabhängig modifizierte. Insgesamt war die Vorhersage der Textur-Parameter dadurch gekennzeichnet, dass die textur-relevanten spektralen *Driver*, die den PLSR-Modellen zugrunde lagen, im *LWIR* zahlreicher waren und mit den quantifizierten Bodenparametern direkter im Zusammenhang standen als im *VNIR-SWIR*. Die indirekten Zusammenhänge mit den eisenhaltigen Mineralen Hämatit und Goethit, auf denen die Vorhersage der Textur-Parameter im *VNIR-SWIR* überwiegend basierte, führte dort zu relativ komplexen PLSR-Modellen.

Die Möglichkeiten, die das *LWIR* für diese Fragestellung bietet, zeigte sich besonders eindrucksvoll bei der Reduktion der Wellenlängen auf die spektralen Spezifikationen flugzeug- (TASI-600) und satellitengetragener (ASTER und HypSIRI) Sensoren. Die Quantifizierung des Sand- und des Tongehaltes konnte auch noch mit der multispektralen ASTER-Auflösung (5 Bänder), ohne merkliche qualitative Einbußen für die Vorhersage, realisiert werden. Der reduzierte spektrale Datenraum deckte dabei alle relevanten spektralen Informationen für die Quantifizierung ab.

Für die quantitative Ableitung des SOC-Gehaltes dagegen reichte die multispektrale Auflösung nicht mehr aus, um robuste PLSR-Modelle aufzubauen. Grundsätzlich konnte unabhängig von der Auflösung weder im *VNIR-SWIR* noch im *LWIR* spektrale *Driver* identifiziert werden, die mit dem SOC-Gehalt in einem direkten Zusammenhang standen. Nur die Modelle aus der hyperspektralen Sensorik (*VNIR-SWIR* und *LWIR*) waren in der Lage, die komplexen Hintergründe dieser Beziehungen für eine erfolgreiche Quantifizierung des SOC-Gehaltes abzubilden – allerdings nur unter Verwendung relativ komplexer PLSR-Modelle.

Der bedeutende Beitrag, den die Volumenstreuung im *LWIR* für die Quantifizierung der Textur-Parameter leistete, machte sich bis zur Auflösung der multispektralen PLSR-Modelle bemerkbar. Selbst in den ASTER-Modellen wurde der vorteilhafte Einfluss der korngrößenabhängigen Wirkung des Transparenz-Features nachgewiesen. Abschließend wurde der spektrale Bereich des *LWIR* für die Erfassung/Quantifizierung von Bodenparametern in Trockengebieten als prädestiniert bewertet und als spektrale Grundlage für zukünftige *Monitoring*-Konzepte zur Überwachung von Bodenerosions-Prozessen empfohlen.

Abstract

This study embraces the feasibility of using the thermal infrared wavelength region for future remote sensing applications to detect/quantify soil parameters. The research is based on soil samples from the semiarid agricultural area of Mullewa, located within the wheat belt of Western Australia. The main focus of this study is to assess the potential of the longwave infrared (*LWIR*), within the atmospheric window between 8 and 14 μm , to predict the content of sand, clay and organic carbon (SOC) in soils. The results are compared with predictions made with the traditionally used solar-reflective wavelength region (visible, *VIS*: 0.4 – 0.7 μm ; near infrared, *NIR*: 0.7 – 1.1 μm ; shortwave infrared, *SWIR*: 1.1 – 2.5 μm).

Due to their characteristic soil properties dryland agricultural regions are particularly prone to desertification processes, such as wind erosion. Their coarse textured soils are low in cementing agents, such as clay or SOC, and hence lacking the ability to resist the erosional forces of wind. Intensified and not-sustainable landuse, as a result over maximizing agricultural production, and the effects of climate change, increase the vulnerability of these ecosystems and hence accelerate desertification. The vast paddocks in the Mullewa region are suffering from seasonal soil loss due to wind erosion during the dry season. During that dry period, which is getting longer due to climate change, the exposed surfaces are loosing mainly the fine, nutrient-rich soil material. This study investigated the soil parameters that crucially influence the soils' surface stability (in addition to the surface roughness and the soil moisture). An upcoming monitoring system, aiming to regularly estimate the soils' erosional condition on such semiarid paddocks, could benefit from these parameters as an important input.

Using laboratory spectroscopy, the Mullewa soil samples were measured, both in the thermal infrared (emission FTIR spectroscopy and directional hemispherical reflection (DHR) spectroscopy) and in the solar-reflective (diffuse reflection spectroscopy) wavelength region. This data was analyzed to determine the relevant content of information for the soil parameters. Multivariate regression analyses (partial least squares regression - PLSR) were used to quantitatively model the soil parameters from the spectral signatures. The PLSR-models were spectrally interpreted to identify the bands that had the most influence on the predictions. Thereby the models' spectral drivers (e.g.: quartz, hematite, grain size, etc.) were determined and their relationships with the observed parameter were assessed.

This basic research demonstrated that the spectral requirements in the *LWIR* are met for monitoring these soil parameters with thermal remote sensing instruments. Furthermore the study found that the relevant spectral information for the detection/quantification of the sand- and the clay content (textural parameters) is explicitly higher in the *LWIR* than in the *VNIR-SWIR*. This observation was addressed on the one hand to the diversity of spectral features within the *LWIR* for both the mineralogy (quartz and kaolinite) and the dependency on the soils' grain size. The outcomes of this study shows that the scope for using the *VNIR-SWIR* wavelength region in dryland applications is limited, due to the soil characteristics typical of this environment. Quartz (SiO_2), as the dominant mineral in semiarid soils, does not contain any distinct spectral features in the *VNIR-SWIR* and thus is not able to reveal its textural dependency. Furthermore, semiarid soils are strongly influenced by the abundance of iron bearing oxides and hydroxides, which can cover the spectral features of other soil parameters. For the soils of Mullewa the spectral interpretation of the PLSR-models has illustrated, that their spectral signatures in the *VNIR* (until $\sim 1.3 \mu\text{m}$), were dominated by the influence of hematite and goethite. The high spectral contrast in this region, produced by iron oxides/-hydroxides, has

driven the predictions to prefer the region until $\sim 1.3 \mu\text{m}$ for the modelling from the actual texture relevant wavelength in the *SWIR* (around the spectral feature of kaolinite at $2.2 \mu\text{m}$).

This is in contrast to the *LWIR*, where the fundamental vibrations of the Si–O bonds due to quartz caused Reststrahlen bands, which have a high spectral contrast. Quartz revealed its characteristic emissivity doublet in the spectral signatures between 8 and $9.5 \mu\text{m}$ and kaolinite showed four distinct spectral features ($9.0 \mu\text{m}$, $9.8 \mu\text{m}$, $10.5 \mu\text{m}$, and $10.95 \mu\text{m}$). Within these Reststrahlen bands a distinct relationship with grain size was revealed, where spectral features of the minerals quartz and kaolinite were included. More over the modelling of the sand- and clay content in the *LWIR* has benefitted additionally from the effect of the transparency feature, which, as a consequence of the volume scattering, has modified the soil spectral signatures from $\sim 9.8 \mu\text{m}$ on with respect to the grain size.

Overall the prediction of the sand- and the clay content was characterized by the fact that the texture related spectral drivers, that formed the basis of the PLSR-models, could be identified in the *LWIR* to a greater extent and in a more direct relationship with the quantified soil parameter than in the *VNIR-SWIR*. The indirect associations with the iron bearing minerals hematite and goethite, which was mainly the basis of the prediction of sand and clay in the *VNIR-SWIR*, resulted in comparatively complex PLSR-models.

The prospect of the *LWIR* for determining soil texture was demonstrated to be even more impressive when reduced to the spectral band specifications of airborne (TASI-600) and spaceborne (ASTER and HypIRI) sensors. The quantification of the sand- and the clay content could be estimated, without noticeable loss of prediction accuracy, even with the multispectral resolution of ASTER (5 bands). This was because the reduced spectral data space (number of bands) still covered all relevant spectral information for the quantification.

For the prediction of the SOC content, on the other hand, the multispectral resolution was not sufficient to establish robust PLSR-models. Basically, regardless of the resolution, neither *VNIR-SWIR* nor *LWIR* spectral drivers could be identified, which were directly associated with the SOC content. Only the hyperspectral sensor systems (*VNIR-SWIR* and *LWIR*) were able to display the complex background of these relationships to successfully quantify the SOC content, but only with comparatively complex PLSR-models.

The significant contribution of the volume scattering in the *LWIR* for predicting the textural parameters became noticeable until the resolution of the multispectral PLSR-models. Even for the models, which used the five ASTER bands, the beneficial influence of the grain size related effect from the transparency feature was still evident. Finally the use of the *LWIR* for the detection/quantification of soil parameters in drylands was regarded as the better choice and was recommended as the spectral basis for future soil erosion monitoring concepts.

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	i
Abstract	iii
Abbildungsverzeichnis	vii
Tabellenverzeichnis	ix
1 Einführung und Zielsetzung	1
1.1 Darstellung des Forschungsstandes	3
1.2 Zielsetzung der Arbeit	5
2 Grundlagen der spektroskopischen Sensorik	7
2.1 Elektromagnetische Strahlung	7
2.2 Grundlegende Interaktionen zwischen elektromagnetischer Strahlung und Materie	8
2.2.1 Emission und Reflexion in den Wellenlängenbereichen der Fernerkundung (VNIR-SWIR, MWIR und LWIR)	9
2.2.2 Wechselwirkungen auf atomarer und molekularer Ebene	15
2.3 Besonderheiten der Interaktionen bei Festkörpern (pedologische und geologische Oberflächen) unter Berücksichtigung ihrer makroskopischen Eigenschaften	17
2.3.1 Transmission bei Festkörpern	17
2.3.2 Emission und Reflexion bei Festkörpern	18
2.4 Spektrale Charakteristika von Bodenparametern	23
2.4.1 VNIR-SWIR	23
2.4.2 LWIR	24
3 Das Untersuchungsgebiet Mullewa	27
3.1 Klima	27
3.2 Geologie	28
3.3 Pedologie	29
3.3.1 Pedologische Beschreibung auf Grundlage der DAFWA Landschaftssysteme und Bodenserien	29
3.4 Landwirtschaftliche Nutzung	31
4 Methodik	34
4.1 Boden-Spektroskopie	34
4.1.1 LWIR: Emissions FTIR-Spektroskopie (μ FTIR/CSIRO)	34
4.1.2 LWIR: Emissions FTIR-Spektroskopie (MIDAC/ITC)	38
4.1.3 LWIR-MWIR-SWIR: DHR-FTIR-Spektroskopie (GFZ)	38
4.1.4 VNIR-SWIR: Diffuse Reflexions-Spektroskopie	40
4.2 Spektrales <i>Resampling</i> auf Fernerkundungs-Sensorik: TASI (32), HyspIRI (6), ASTER (5) und HyMap (116)	40
4.3 Quantifizierung der pedologischen Parameter	42
4.3.1 Multivariate Regressionsanalyse	42
4.3.2 Spektrale Interpretation der PLSR-Modelle	45

4.4	Beprobung und Analytik	46
5	Ergebnisse der Analytik	48
6	Ergebnisse der spektralen Interpretation	50
6.1	Spektrale Interpretation des <i>VNIR-SWIR</i>	50
6.2	Spektrale Interpretation des <i>LWIR</i>	52
6.3	Vergleich der Spektren aus der thermalen Sensorik	55
6.3.1	Beispiel: Quarz-Referenzsand <i>Cook</i>	55
6.3.2	Beispiel: Quarz-Referenzsand <i>Merck</i>	57
6.3.3	Beispiel: Mullewa Bodenproben (Auswahl)	57
6.3.4	Fehlerquelle 1: Temperatur-Empfindlichkeit	59
6.3.5	Fehlerquelle 2: Abkühlung während der Messung	61
6.4	Interpretation der Bodenspektren in Abhängigkeit der Größen ihrer pedologischen Parameter	62
6.5	Zusammenfassung und Fazit	65
7	Ergebnisse der quantitativen Modellierung	68
7.1	Quantifizierung der Bodenparameter mittels thermaler Sensorik	68
7.1.1	Voll-Auflösung (μ FTIR, MIDAC und DHR)	70
7.1.2	Spektrales <i>Resampling</i> : TASI (32), HypSIRI (6) und ASTER (5)	78
7.2	Vergleich der Quantifizierung der Bodenparameter aus der thermalen und der solar-reflektiven Sensorik (Voll-Auflösung und <i>Resampling</i> auf HyMap)	84
7.2.1	Vorhersage der Bodenparameter im Vergleich: <i>VNIR-SWIR</i> versus <i>LWIR</i>	87
7.2.2	Interpretation der <i>Rk</i>	88
7.2.3	Interpretation der <i>W-loadings</i>	89
7.3	Quantifizierung des Geo-Chemismus (<i>XRF</i> -Analyse) mittels thermaler Sensorik (<i>Resampling</i> auf fünf <i>LWIR</i> ASTER-Bänder)	92
7.4	Zusammenfassung und Fazit	95
8	Diskussion der Ergebnisse mit Ausblick	100
	Literaturverzeichnis	106
	Anhang A: PLSR-Modelle zur Quantifizierung	113
	Anhang B: PLSR-Modelle zum Geo-Chemismus (XRF-Analyse)	120
	Anhang C: Analytik	122
	Danksagung	123
	Eidesstattliche Erklärung	125

Abbildungsverzeichnis

2.1	Bodenspektrum im Wellenlängenbereich von 1,5 bis 14 μm	7
2.2	Spektrale Strahldichten eines Schwarzkörpers bei unterschiedlichen Temperaturen	9
2.3	Transmissionseigenschaften atmosphärischer Gase (<i>VNIR-SWIR-MWIR-LWIR</i>)	10
2.4	Solare spektrale Strahldichte nach atmosphärischer Transmission	11
2.5	Spektrale Strahldichte eines Schwarzkörpers bei 293 Kelvin (Raumtemperatur)	12
2.6	Spektrale spezifische Ausstrahlung eines Schwarzkörpers	13
2.7	Unterschiede im spektralen Kontrast von Boden- <i>Feature</i>	16
2.8	Strahlengänge nach der Theorie der Oberflächen- und der Volumenstreuung	19
2.9	Realteil und Imaginärteil des Brechungsindex	21
2.10	Transmissions- und Reflektanz-Spektren (DHR-Messung) von Quarz und Calcit	22
2.11	Typische Bodenparameter im <i>VNIR-SWIR</i>	24
2.12	Spektrale Signaturen aus der ASTER-Spektralbibliothek	25
2.13	Repräsentatives Bodenspektrum im <i>VNIR-SWIR-MWIR-LWIR</i>	25
3.1	Lage des Untersuchungsgebietes Mullewa in West-Australien	27
3.2	Isohyeten für die Region um das Untersuchungsgebiet Mullewa	28
3.3	Typische Bodenprofile der Mullewa Bodenserien	31
3.4	Pedologie im Untersuchungsgebiet Mullewa	32
4.1	<i>SRF</i> der Sensoren TASI-600, HyMAP, ASTER-TIR und HypIRI-TIR	41
4.2	Beispiel eines PLSR-Modells	45
5.1	Boxplot SOC-Gehalt	49
5.2	Boxplots der Textur-Parameter für die verwendeten Daten-/Probensätze	49
5.3	Kreuz-Korrelationen der Bodenparameter	49
6.1	Reflektanzen ausgewählter Bodenspektren im <i>VNIR-SWIR</i>	51
6.2	Emissivitäten ausgewählter Bodenspektren im <i>LWIR</i>	53
6.3	Reflektanzen ausgewählter Bodenspektren im <i>LWIR-MWIR-SWIR</i>	54
6.4	Emissivitäts-Spektren des Quarz-Referenzsand <i>Cook</i>	56
6.5	Emissivitäts-Spektren des Quarz-Referenzsand <i>Merck</i>	57
6.6	Auswahl von Bodenspektren aus der thermalen Sensorik	58
6.7	Steigende Reflektanzen an den <i>CFF</i> mit abnehmendem SiO_2 -Gehalt	60
6.8	Temperatur-Empfindlichkeit bei der Berechnung der Emissivität	60
6.9	Abkühlungs-Effekt der Proben während der MIDAC-Messung	63
6.10	Einfluss der Korngröße auf die Reflektanz im <i>LWIR</i>	64
6.11	Einfluss des Transparenz- <i>Features</i> auf die Bodenspektren mit niedrigen Tongehalten	64
7.1	Spektrale Dimensionen der thermalen Sensorik	69
7.2	Ausführliche Darstellung der PLSR-Ergebnisse des Sandgehaltes	71
7.3	PLSR-Ergebnisse des Sandgehaltes	72
7.4	Erhöhter Rauschanteil in den DHR-Spektren	74
7.5	PLSR-Ergebnisse des Tongehaltes	75
7.6	PLSR-Ergebnisse des SOC-Gehaltes	77
7.7	PLSR-Ergebnisse (thermale Sensorik – <i>Resampling</i>) Referenz versus PLSR-Modell	80

7.8	PLSR-Ergebnisse (thermale Sensorik – <i>Resampling</i>) erklärte y-Varianz	81
7.9	PLSR-Ergebnisse (thermale Sensorik – <i>Resampling</i>) Regressionskoeffizienten . . .	82
7.10	Korngrößen-Index nach <i>Salisbury (1992)</i>	83
7.11	Spektrale Dimensionen für die PLSR-Modellierung (solar-reflektive Sensorik) . .	84
7.12	Ergebnisse der PLSR-Modellierung (solar-reflektive Sensorik)	85
7.13	Ergebnisse der PLSR-Modellierung (solar-reflektive Sensorik, HyMap- <i>Resampling</i>)	86
7.14	Spektrale Charakteristika von Eisenoxid (Hämatit) und Eisenhydroxid (Goethit)	88
7.15	Auswahl von Reflexions-Spektren im <i>VNIR</i> braun-roter und braun-gelber Böden	89
7.16	<i>W-loadings</i> der PLSR-Modelle für die Vorhersage des Sand- und Tongehaltes . .	91
7.17	Quantifizierung des SiO_2 - und des Al_2O_3 -Gehaltes aus den MIDAC-Spektren . .	93
7.18	Kreuz-Korrelationen (R^2 -Werte) der Boden-Parameter sowie des Geo-Chemismus	93
7.19	Regressionskoeffizienten der PLSR-Modelle: SiO_2 - und Al_2O_3 -Gehalt	94
B.1	Vorhersagemodelle der Elemente/Oxide aus der <i>XRF</i> -Analyse	120
B.2	PLSR-Ergebnisse – Entwicklung der erklärten y-Varianzen	121

Tabellenverzeichnis

2.1	Wellenlängenpositionen spektral aktiver organischer Verbindungen in Böden . . .	26
3.1	Bodentypen nach der Australischen Bodenklassifikation	30
4.1	Zusammenfassung der Datensätze WEST, W-FARM und OST-WEST	47
5.1	Beschreibende Statistik der Bodenparameter	48
7.1	Überblick der gerechneten PLSR-Modelle für die Bodenparameter	68
7.2	Vergleich der PLSR-Ergebnisse aus dem VNIR-SWIR und dem LWIR	87
C.1	Beschreibende Statistik der Boden- und XRF-Parameter	122

Kapitel 1

Einführung und Zielsetzung

Der Druck auf die weltweite Produktion von Agrargütern zur Gewährleistung unserer Nahrungsmittelsicherheit wird Prognosen zur Folge in den nächsten Dekaden in beispiellosem Maße zunehmen. Begründet wird diese Erwartung mit der schnell wachsenden globalen Bevölkerung, der Art und dem Umfang der Pro-Kopf-Nachfrage für Nahrungsmittel (Essgewohnheiten und der Trend zu ressourcenintensiveren Nahrungsmitteln), dem Klimawandel (veränderte Niederschlags- und Temperatur-Muster und die Häufung von Extrem-Wetterereignissen) sowie dem Wettbewerb um die Nutzung von landwirtschaftlichen Flächen (Nahrungsmittelproduktion, Produktion von Bio-Treibstoffen oder nachwachsenden Rohstoffen). Zwangsläufig wird diese Entwicklung auch zu einer Intensivierung der landwirtschaftlichen Produktion führen, um eine globale Verfügbarkeit von Nahrungsmitteln garantieren zu können (FAO, 2012, 2011; Government Office for Science, 2011; World Bank, 2010).

Den Trockengebieten der Erde (engl. *drylands*; sie umfassen aride, semiaride und subhumide Gebiete) kommt in diesem Zusammenhang eine besondere Rolle zu. In ihnen werden rund 44 % der weltweiten Nahrungsmittel produziert. Aufgrund ihrer sensiblen Böden - bedingt durch den grob texturierten Charakter, dem geringen Gehalt an organischem Material, dem geringen Speichervermögen für Wasser und Nährstoffe und der geringen natürlichen Fruchtbarkeit und Widerstandsfähigkeit - sind diese Ökosysteme besonders gefährdet für Prozesse der Desertifikation (Land Degradation in Trockengebieten). Eine intensive, nicht nachhaltige Nutzung als Folge der Maximierung der landwirtschaftlichen Produktion sowie Klimaveränderungen verschärfen die Vulnerabilität dieser Ökosysteme und beschleunigen dadurch die Desertifikation (UNCCD, 2012).

Nicht ohne Grund bezeichnet die *United Nations Convention to Combat Desertification* Böden als „... *the most significant nonrenewable geo-resource that we have for ensuring water, energy, and food security for present and future generations.*“ (UNCCD, 2012). Darüber hinaus spielen Böden eine bedeutende Rolle in der Diskussion um die Stoffkreisläufe von Treibhausgasen, welche für den Klimawandel verantwortlich gemacht werden, da sie den größten terrestrischen Kohlenstoff-Speicher und gleichzeitig eine der wichtigsten natürlichen Quellen für CO₂ in der Atmosphäre darstellen (Schrumpf und Trumbore, 2012). Den landwirtschaftlichen Praktiken der Bodenbearbeitung wird dabei besonders viel Aufmerksamkeit zuteil, da Ackerflächen enorme Mengen von Kohlenstoff binden. Der Gehalt an Kohlenstoff in den ersten 30 cm Boden entspricht fast dem der gesamten Atmosphäre (Government Office for Science, 2011).

Im Laufe von anhaltender Degradation büßen Böden jedoch diese Funktionen ein. Auf landwirtschaftlich genutzten Böden der Trockengebiete zeigt sich Desertifikation häufig in Form von Bodenschwund (engl. *soil loss*), der unter dem Einfluss von Winderosion als Verlust des nährstoffreichen Oberbodens in Erscheinung tritt und die Produktivität der Ackerflächen stark reduziert. Die grob texturierten Böden der Trockengebiete zeigen meist nur geringe Gehalte an Tonmineralen und organischem Material - Bodeneinhaltsstoffe, die durch ihre Klebewirkung der Bodentextur ihre Festigkeit und damit Oberflächenstabilität verleihen. Saisonal stark ausgetrocknete Oberflächen und gleichzeitig hohes Windaufkommen verschärfen das Problem zusätzlich und machen diese Böden besonders anfällig für Winderosion.

Vor diesem Hintergrund sind eine Vielzahl wissenschaftlicher Disziplinen (wie etwa: Bodenkunde, Geologie, Klimatologie, Agrar- und Umweltwissenschaften) an einer regelmäßigen Beobachtung (*Monitoring*) von Bodenoberflächen interessiert, die möglichst eine quantitative Erfassung von Bodenparametern erlaubt. Im Mittelpunkt diese Aufmerksamkeit stehen dabei meist die Korngrößenverteilung (Bodentextur) und der organische Kohlenstoffgehalt (SOC, engl. *soil organic carbon*). Aufgrund ihrer Bedeutung für die Oberflächenstabilität von Böden stellen beide Parameter unverzichtbare Eingangsgrößen für die Modellierung von Erosionsprozessen durch Wind dar (neben der Oberflächenrauigkeit und der Bodenfeuchte) (Shao und Leslie, 1997; Chappell et al., 2006; Shao et al., 2007). Sowohl die Bodentextur als auch der SOC-Gehalt sind zudem essentielle Input-Parameter für Boden-Vegetations-Atmosphären Transfer Modelle, mit deren Unterstützung Veränderungen der globalen Landnutzung und Landbedeckung vorhergesagt werden sollen, die sich aus den klimatischen und anthropogenen Umweltbeeinträchtigung ergeben (Sanchez et al., 2009).

Die Fernerkundung bietet die Möglichkeit eines großflächigen *Monitorings* in den betroffenen Ökosystemen, auf dessen Grundlage hochaufgelöste digitale Bodenkarten erstellt werden können (*digital soil mapping*), die sich schnell aktualisieren lassen (Sanchez et al., 2009). Die Technik der hyperspektralen Fernerkundung (Abbildende Spektroskopie) und deren Kombination mit statistischen Auswertungsverfahren aus dem Bereich der Chemometrik ermöglichen inzwischen auch eine quantitative Ableitung von Bodenparametern. Auch wenn dabei noch mit erheblichen Schwierigkeiten gekämpft wird (wie etwa: spektrale Auflösung, Signal-Rausch-Verhältnis, atmosphärische Abschwächung des Signals und Mischpixel), welche für die Diskrepanz zu den Erfolgen aus der punktuellen Boden-Spektroskopie im Labor verantwortlich sind (Ben-Dor et al., 2008).

Bisher basieren Arbeiten auf dem Gebiet der quantitativen Ableitung von Bodenparametern mittels Fernerkundungs-Sensorik hauptsächlich auf dem solar-reflektiven Wellenlängenbereich zwischen $0,4 - 2,5 \mu\text{m}$ (*VNIR-SWIR*). Obwohl dabei teilweise sehr brauchbare Resultate erzielt wurden (Ben-Dor et al., 2008), stößt der Bereich des *VNIR-SWIR* für Anwendungen in Trockengebieten aufgrund der charakteristischen pedologischen Eigenschaften oft an seine Grenzen. So wird die Korngrößenverteilung tonarmer, stark sandiger Böden maßgeblich von ihrem Hauptbestandteil Quarz (SiO_2) bestimmt, einem Mineral, welches im Wellenlängenbereich des *VNIR-SWIR* keinerlei spezifische spektrale Eigenschaften besitzt (Salisbury et al., 1991). Außerdem werden die Böden arider und semiarider Gebiete im Allgemeinen von eisenhaltigen Oxiden und Hydroxiden dominiert (zumindest optisch, da oft ausschließlich die Kornoberflächen entsprechend angereichert sind), die im Gegensatz zu Quarz hohe spektrale Aktivität im Bereich des *VNIR* zeigen (Hunt et al., 1971). Ihr spektraler Einfluss auf diesen Wellenlängenbereich ist jedoch derart bestimmend, dass sie die spektralen Merkmale andere Bodeneigenschaften grundsätzlich überdecken. Auf diese Weise werden auch die spektralen Informationen des SOC im *VNIR* unkenntlich gemacht, der in diesen Böden ohnehin nur geringfügig vorhandenen ist.

Dagegen sind die Möglichkeiten einer Nutzung der Wellenlängen des thermalen Infrarots im Bereich des atmosphärischen Fensters zwischen $8 \text{ und } 14 \mu\text{m}$ (Langwelliges Infrarot, *LWIR*) für die quantitative Ableitung pedologischer Parameter noch weitgehend unerforscht. Diese Entwicklung wurde aufgehalten durch die mangelnde Verfügbarkeit von hyperspektralen thermalen Sensoren sowie die relativ aufwendige Prozessierung der Emissions-Daten angesichts ihres vergleichsweise komplexen physikalischen Hintergrundes. Dabei hat das *LWIR* das Potential, die Grenzen des solar-reflektiven Bereichs für bodenkundliche Anwendungen der Fernerkundung zu erweitern. So signalisieren die spektralen Charaktereigenschaften einiger Minerale (Quarz, Kaolinit, Hämatit oder Goethit), welche die Pedologie in Trockengebieten maßgeblich prägen,

dass der Bereich des *LWIR* für ihre Detektion/Quantifizierung prädestiniert ist. Die molekularen Fundamental-Schwingungen der Si-O Bindungen von Quarz erzeugen in diesem Wellenlängenbereich Reststrahlenbanden mit hohem spektralen Kontrast (Salisbury und D’Aria, 1992a), wogegen der Einfluss von Eisenoxiden/-hydroxiden relativ gering ist (Salisbury et al., 1991). Zudem offenbart das *LWIR* innerhalb der Reststrahlenbanden gleich mehrere spektrale Merkmale von Tonmineralen (wie etwa Kaolinit). Im *VNIR-SWIR* dagegen wird die Ton-Absorptionsbande bei $2,2\ \mu\text{m}$ oft unter dem Einfluss trockener Vegetation durch die Zellulosebande bei $2,08\ \mu\text{m}$ gestört (Rodgers und Cudahy, 2009). Darüber hinaus zeigen sich für partikuläre Oberflächen im *LWIR* charakteristische korngrößenabhängige spektrale Effekte, die sich aus den Volumenstreuungsprozessen des feinen Bodenmaterials ergeben (Salisbury und Walter, 1989).

Das Untersuchungsgebiet Mullewa befindet sich in einer semiariden Region des West-Australischen Weizengürtels. Die Landwirtschaft in diesem Raum erfährt in zunehmendem Maße die Auswirkungen von Desertifikations-Prozessen, wenn Jahr für Jahr während der Trockenzeit (Brachzeit) nährstoffreiches und feinkörniges Bodenmaterial durch den Effekt der Winderosion verloren geht. Die Aussichten der lokalen Farmer trüben sich zudem durch die Prognose, dass sich die Periode der Trockenzeit durch den Klimawandel noch verlängert. Ein *Monitoring* der betroffenen Bodenoberflächen mittels thermaler Fernerkundung scheint vor dem Hintergrund der pedologischen Eigenschaften des Untersuchungsgebietes vielversprechend. Die wachsende Verfügbarkeit von thermalen Systemen auf dem Markt für Fernerkundungs-Sensoren (wie etwa: TASI-600, Itres; AisaOWL, Specim; Hypercam, Telops oder HI 90, Bruker) wird zukünftige *Monitoring*-Ansätze auf diesem Gebiet ermöglichen.

1.1 Darstellung des Forschungsstandes

Das gesteigerte Interesse an fernerkundlichen Methoden für bodenkundliche Untersuchungen zeichnet sich seit den 1970er und 1980er Jahren fortlaufend ab. Dabei fungierte die Laborspektroskopie in der Regel als Vorläufer und lieferte erste Erkenntnisse, die dann als Grundlage für eine fernerkundliche Übertragung dienten. Erste Studien belegten die Korrelationen zwischen unterschiedlichen Bodeneigenschaften (insb. der Einfluss von Eisen und organischer Substanz) und der bidirektionalen Reflektanz im Wellenlängenbereich des *VNIR* durch Condit (1970) sowie unter dem zusätzlichem Einsatz des *SWIR* durch Stoner und Baumgardner (1981). Für die Wellenlängen des *LWIR* fassten erstmals Salisbury und D’Aria (1992a) das spektrale Verhalten verschiedenen Bodentypen qualitativ zusammen, wobei die Daten auf direktional-hemisphärische Reflektanz-Messungen (DHR) basierten.

Mit zunehmender Verbreitung der Nahinfrarotspektroskopie (*NIRS* oder NIR-Spektroskopie, von $\sim 1,0$ bis $2,5\ \mu\text{m}$) und der Infrarotspektroskopie (v.a. FTIR-Spektroskopie, von $\sim 2,5$ bis $25\ \mu\text{m}$) wurde die Technik auch für geologische und pedologische Analysen immer populärer, vor allem weil sie schnell, nicht-invasiv und preiswert gegenüber der traditionellen Laboranalytik war. Zudem verlangte die Fernerkundung für ihre Methoden nach spektral hochaufgelösten Referenzen von möglichst vielen *Endmembers*. In zahlreichen Arbeiten wurden daher Minerale und organische Verbindungen immer präziser identifiziert (Irons et al., 1989, 1992; Niemeyer et al., 1992; Clark, 1999; Ben-Dor et al., 1999; Chabrilat et al., 2002) und in spektralen Bibliotheken zusammengefasst (Grove et al., 1992; Clark et al., 2007; Baldridge et al., 2009).

Anders als in der Geologie, konzentriert sich die spektrale Information von Böden jedoch nicht auf konkrete Absorptionsbanden (monokausale Ableitung), sondern spiegelt sich multifaktoriell über den gesamten Verlauf des Spektrums wider. Für eine Quantifizierung von Bodenparametern

sind daher adäquate empirische Verfahren zur Auswertung essentiell. Infolge der Entwicklungen im Bereich der Chemometrik, werden inzwischen mathematische und statistische Auswertungsmethoden - wie etwa die multivariate Datenanalyse - benutzt, um die hochdimensionalen spektralen Datensätze gezielt auf Korrelationen mit relevanten Bodenparametern zu durchsuchen. Verschiedene Autoren veranschaulichten bereits das Potential der Bodenspektroskopie unter Verwendung multivariater Kalibrierungs-Methoden, wie etwa der multiplen linearen Regression (MLR), der schrittweisen multiplen linearen Regression (SMLR), der Hauptkomponentenregression (PCR) oder der *partial least squares* Regression (PLSR). Eine fernerkundliche Anwendung fand dabei insbesondere für den thermalen Spektralbereich meist keine Berücksichtigung.

Bereits Dalal und Henry (1986) zeigten für den Wellenlängenbereich zwischen 1,0 und 2,5 μm , dass mit der NIRA-Analysemethode (was für *near-infrared analyses* steht und aus einer Kalibrierung mittels MLR und einer anschließenden Validation besteht) der Gehalt an SOC, der Gesamtstickstoffgehalt sowie die Bodenfeuchte in Australischen Böden bestimmt werden können. Mit ähnlicher Methode (MLR aus 63 Bändern im Bereich des *SWIR*) quantifizierten später Ben-Dor und Banin (1995) weitere Bodenparameter aus ariden und semiariden Böden Israels. Die Ergebnisse der Validierung waren allerdings nicht für alle Parameter überzeugend (Tongehalt ($R^2 = 0,56$), organische Substanz ($R^2 = 0,55$), spezifische Oberfläche ($R^2 = 0,7$) und Kationenaustauschkapazität ($R^2 = 0,64$)).

Chang et al. (2001) untersuchten in ihrer Studie über 800 Bodenproben aus unterschiedlichen klimatischen Regionen der USA auf den Zusammenhang zwischen 33 chemischen, physischen und biologischen Bodenparametern und den spektralen Signaturen im Wellenlängenbereich von 1,3 bis 2,5 μm . Auf Grundlage einer PCR wurden sehr gute Vorhersageergebnisse ($R^2 > 0,8$) für den Gesamtstickstoffgehalt, den Gesamtkohlenstoffgehalt, die Bodenfeuchte und die Kationenaustauschkapazität sowie für die Korngrößenfraktionen Sand ($R^2 = 0,82$; RMSE(X-VAL) = 11,93 %) und Schluff ($R^2 = 0,84$; RMSE(X-VAL) = 9,51 %) erzielt. Der Tongehalt konnte mit $R^2 = 0,67$ (RMSE(X-VAL) = 4,06 %) nicht ganz so genau bestimmt werden. Die Studie zeichnet sich durch ihre hohe Probenzahl und die enorme Variationsbreite in den Bodenparametern aus. Dabei sollte jedoch beachtet werden, dass die spektralen Informationen beider atmosphärischer Fenster mit in die PCA eingingen. Die Korrelationskoeffizienten zeigen dabei einen deutlichen positiven Einfluss dieser Wellenlängen auf die Ergebnisse.

Für das thermalen Infrarot tauchten quantitative Ansätze zur Ableitung pedologischer Parameter hauptsächlich im Rahmen der Bodenanalytik mittels FTIR-Spektroskopie auf, wo entsprechende statistische Verfahren schon länger etabliert waren. Dabei zeigten beispielsweise Janik et al. (1998), dass eine Vielzahl von organischen und anorganischen Bodenparametern (wie etwa: SOC oder Bodentextur) im Wellenlängenbereich von 2,5 bis 25 μm aus DRIFT-Laborspektren (*diffuse reflectance infrared fourier transform*) quantitativ mithilfe einer PLSR bestimmt werden können. Mittels einer PLSR leiteten sie aus den DRIFT-Reflektanzen, neben vielen anderen Bodenparametern, den SOC- ($R^2 = 0,93$), sowie den Sand- ($R^2 = 0,94$), Schluff- ($R^2 = 0,84$) und Tongehalt ($R^2 = 0,79$) ab, allerdings nicht unter Angabe der Vorhersagefehler oder der benötigten Faktorenzahlen. Ein Großteil der hierfür benutzten Wellenlängen würde für eine fernerkundliche Erfassung allerdings nicht zur Verfügung stehen.

McCarty et al. (2002) zeigten in ihrer Studie zur Ableitung des Kohlenstoffgehaltes aus 273 Bodenprofilproben, die aus Untersuchungsgebieten der USA mit sehr unterschiedlichen klimatischen Bedingungen stammten, sowohl für die DRIFT-Spektroskopie als auch die NIRS-Spektroskopie, die Möglichkeiten einer quantitativen Bestimmung aus Reflektanz-Spektren. Mithilfe einer PLSR entwickelten sie Modelle, die zwar in der Lage waren den SOC-Gehalt im Spektralbereich zwischen 1,1 und 2,5 μm ($R^2 = 0,82$; RMSEP = 0,55 %; 18 Faktoren) und im Bereich von 2,5 bis 25

μm ($R^2 = 0,94$; RMSEP = 0,32 %; 17 Faktoren) mit hervorragenden R^2 -Werten vorherzusagen, welche allerdings im Schatten eines sehr komplexen PLSR-Modells standen.

Die beschriebenen Studien fanden jedoch ohne Berücksichtigung einer fernerkundlichen Anwendung statt. So lässt die DRIFT-Methode keinen quantitativen Vergleich mit den Emissions-Spektren aus Fernerkundungs-Sensoren zu (ebenso wenig eignen sich dafür die FTIR-Verfahren: KBr-Tabletten oder ATR-Infrarotspektroskopie). Einen quantitativen Vergleich mit Emissions-Spektren aus Fernerkundungs-Sensoren sind nur mittels direktional-hemisphärischen Reflexions-Messungen (DHR) oder passiven Emissions-Messungen – wie der Emissions-FTIR-Spektroskopie – möglich (Salisbury et al., 1991; Salisbury und D’Aria, 1992a; Hecker et al., 2011). Darüber hinaus wurde in den genannten Studien eine Vielzahl von spektralen Bändern genutzt, die wegen des atmosphärischen Einflusses für fernerkundliche Anwendungen nicht zur Verfügung stehen.

Studien für den solar-reflektiven Wellenlängenbereich mit dem Ziel einer fernerkundlichen Anwendung, in denen erfolgreich pedologische Parameter aus hyperspektralen Bilddaten abgeleitet wurden, existieren beispielsweise für den Eisengehalt (Bartholomeus et al., 2007), den SOC-Gehalt (Gomez et al., 2008; Stevens et al., 2010; Geringhausen et al., 2012) oder den Tongehalt (Geringhausen et al., 2012). Für den thermalen Wellenlängenbereich konzentrieren sich fernerkundliche Studien nach wie vor auf den Publikationen der 1990er Jahre, die im Zuge der Entwicklung von multispektralen thermalen Fernerkundungs-Sensoren, flugzeug- (TIMS, 6 Kanäle) sowie satelliten- (ASTER, 5 Kanäle) gestützten Systemen entstanden. Es handelte sich dabei vorwiegend um qualitative Detektionen (teilweise auch mit extraterrestrischem Fokus), welche die spektralen Emissivitäten von geologischen und pedologischen Oberflächenmaterialien charakterisierten (Salisbury et al., 1987; Salisbury und Walter, 1989; Salisbury et al., 1991; Salisbury und D’Aria, 1992a; Salisbury et al., 1994; Korb et al., 1999; Hook et al., 1999). In dieser Phase entstanden auch die ersten einschlägigen Arbeiten, die den Effekt der Korngröße auf die spektrale Emissivität von partikulären Materialien untersuchten (Salisbury und D’Aria, 1992b; Johnson et al., 1998). Salisbury und D’Aria (1992b) präsentierten in ihrer Arbeit ein Band-Ratio für die ASTER-Kanäle 10 ($\sim 8,475 \mu\text{m}$) und 14 ($\sim 11,3 \mu\text{m}$), mit dessen Hilfe sie in der Lage waren, die Korngrößen von Bodenproben abzuschätzen.

1.2 Zielsetzung der Arbeit

Ziel der Arbeit ist es, den Wellenlängenbereich des *LWIR* bezüglich der Möglichkeiten einer quantitativen Ableitung pedologischer Parameter (Ton- und Sandgehalt sowie Gehalt an organischem Kohlenstoff) zu beurteilen, wie sie sich in den Agrarböden des semiariden Untersuchungsgebietes Mullewa in West-Australien darstellen. Grundlage dieser Untersuchung sind dabei die Methoden der thermalen Laborspektroskopie. Das *LWIR* wird dafür mit dem herkömmlichen solar-reflektiven Wellenlängenbereich (*VNIR-SWIR*) verglichen, wobei beide Bereiche auf die spektralen Kanäle beschränkt werden, die für eine fernerkundliche Erfassung unter atmosphärischem Einfluss zur Verfügung stehen. Vor dem Hintergrund der spektralen Einschränkungen im *VNIR-SWIR*, die sich aus den typischen pedologischen Bedingungen in Trockengebieten ergeben (sehr hohen Quarzgehalt, sehr niedriger Tonanteil sowie starker spektraler Effekt von Eisenoxiden/-hydroxiden, etc.), untersucht diese Arbeit, ob und in welchem Maße sich die Detektion/Quantifizierung mit dem Wellenlängenbereich des *LWIR* realisieren lässt.

Für die ausgedehnten Agrarflächen des Untersuchungsgebietes Mullewa, die alljährlich während der Trockenzeit durch die Einwirkung von Winderosion, ihres nährstoffreichen und feinkörnigen Bodenmaterials beraubt werden, soll diese Grundlagenstudie für das *LWIR* klären, ob

die spektralen Voraussetzungen für ein mögliches thermales *Monitoring* dieser Erosions- bzw. Akkumulations-Prozesse gegeben sind. Dabei stehen die pedologischen Parameter Bodentextur sowie der Gehalt an organischem Kohlenstoff im Vordergrund, da ihr Vorkommen maßgeblich diese Oberflächendynamik bestimmt.

Zur Umsetzung dieser Ziele wurde folgende Vorgehensweise gewählt: Eine Beschreibung der spektralen Merkmale der Bodenproben im *LWIR* und im *VNIR-SWIR* soll zunächst deren Potential für die Anwendung diskutieren. Auf der Grundlage von Bodenproben und Quarz-Referenzsanden wird zudem die Reproduzierbarkeit der *LWIR*-Spektren aus unterschiedlichen thermalen Sensoren und den entsprechenden Prozessierungs-Methoden erörtert und mögliche Fehlerquellen werden diskutiert. Mit den Methoden der multivariaten Datenanalyse sollen die pedologischen Parameter unter Angabe der Genauigkeit modelliert und vorhergesagt werden.

Die Unterschiede zwischen der thermalen und der solar-reflektiven Sensorik werden unter Berücksichtigung unterschiedlicher spektraler Auflösungen herausgearbeitet: zum einen die jeweiligen Spektrometer-Auflösungen und zudem ein spektrales *Resampling* auf hyperspektrale Flugzeugsensoren. Für das *LWIR* werden zusätzlich die spektralen Spezifikationen multispektraler Satelliten mit in Betracht gezogen. Abschließend soll für das *LWIR* geprüft werden, ob eine Quantifizierung des Geo-Chemismus (Ergebnisse aus der Röntgenfluoreszenz-Analyse) auf Grundlage einer multispektralen Sensorik möglich ist. In allen Modellen werden diejenigen spektralen Bänder identifiziert und bewertet, welche die Quantifizierung am stärksten beeinflussten.

Kapitel 2

Grundlagen der spektroskopischen Sensorik

Um Objekte aus der Distanz charakterisieren zu können, bedient sich die spektroskopische Sensorik der physikalischen Interaktion zwischen elektromagnetischer Strahlung (eS) und Materie. Wellenlängenabhängige Wechselwirkungen an Atomen oder Molekülen führen dabei zu charakteristischen spektralen Merkmalen, die als Energieunterschiede in der eS beobachtet werden und somit qualitative und quantitative Aussagen über die materialspezifische Zusammensetzung eines Untersuchungsobjekts erlauben. Eine entsprechende Sensorik detektiert diese Wechselwirkungen als Werte der Absorption/Emission, der Reflektanz oder der Transmission, die dann in grafischer Form als Spektrum dargestellt werden können. Dazu wird die elektromagnetische Energie als Funktion der Wellenlänge aufgetragen (Abb. 2.1). Dieses Kapitel fasst die Grundlagen der spektroskopischen Sensorik zusammen. Eine eingehende Betrachtung zu den strahlungsphysikalischen Prozessen dazu zeigen Hunt (1980), Hapke (2005) und Schowengerdt (2006).

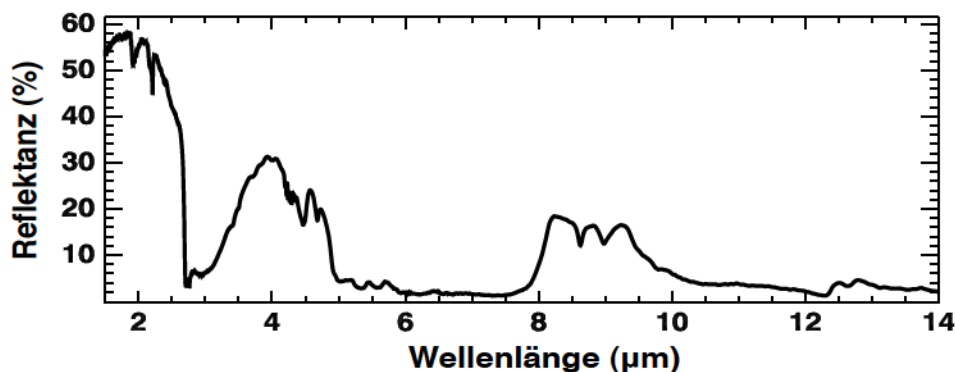


Abbildung 2.1: Bodenspektrum (direktional-hemisphärische Reflektanz – DHR) im Wellenlängenbereich von 1,5 bis 14 μm (FTIR-Labormessung).

2.1 Elektromagnetische Strahlung

Jeder Körper mit einer Temperatur größer als der absolute Nullpunkt emittiert eS . Diese Ausstrahlung erfolgt als Funktion seiner Temperatur und wird für einen Schwarzkörper (Emissivität, $\varepsilon = 1$) durch das Stefan-Boltzmann-Gesetz beschrieben:

$$M = \varepsilon \sigma T^4 \quad (2.1)$$

wobei M die über das gesamte Spektrum abgegebene Strahlung ist [W/m^2]; σ die Stefan-Boltzmann Konstante = $5,669 \cdot 10^{-8} [\text{Wm}^{-2}\text{K}^{-4}]$; T die absolute Temperatur in Kelvin.

Die Wellenlänge λ_{max} , an der die Ausstrahlung ein Maximum erreicht, liefert das Wiensche Verschiebungsgesetz:

$$\lambda_{max} = \frac{2898}{T} \quad (2.2)$$

wobei λ_{max} in μm und T in Kelvin eingehen. Dabei gilt: Mit zunehmender Temperatur verschiebt sich das Maximum der ausgestrahlten Energie in Richtung kürzerer Wellenlängen. (Man beachte, dass die Maxima aus Frequenz- und Wellenlängen-Darstellung nicht übereinstimmen.)

Die spektrale spezifische Ausstrahlung (engl. *spectral radiant exitance*) eines Schwarzkörpers beschreibt die Plancksche Formel:

$$M_\lambda = \frac{C_1}{\lambda^5 [e^{\frac{C_2}{\lambda T}} - 1]} \quad (2.3)$$

wobei M_λ : spektrale spezifische Ausstrahlung [$\text{W m}^{-2} \mu\text{m}^{-1}$]; T : die Temperatur des Schwarzkörpers in Kelvin (K); $C_1 = 3.74151 \times 10^8 \text{ W m}^{-2} \mu\text{m}^4$; $C_2 = 1.43879 \times 10^4 \mu\text{m K}$. Für die thermale Fernerkundung ist die Plancksche Formel und das Wiensche Verschiebungsgesetz von entscheidender Bedeutung. Sie zeigen, dass gleiche Materialien mit unterschiedlichen Temperaturen sich auch in ihrem spektrales Emissionsverhalten unterscheiden (vgl. Kap. 2.2.1).

Die Oberfläche eines Schwarzkörpers verhält sich wie ein Lambert-Strahler, wobei die Beziehung zwischen der spektralen Strahldichte (L_λ) und spektraler spezifischer Ausstrahlung (M_λ) sich wie folgt ergibt:

$$L_\lambda = \frac{M_\lambda}{\pi} \quad (2.4)$$

wobei L_λ in [$\text{W m}^{-3} \mu\text{m}^{-1} \text{sr}^{-1}$] eingeht.

Die Sonne repräsentiert in erster Annäherung einen Schwarzkörper, der bei einer Temperatur von etwa 6000 Kelvin eS emittiert. Sie stellt damit die bedeutendste natürliche Strahlungsquelle für die Fernerkundung dar. Das menschliche Auge hat sich an ihr Ausstrahlungs-Maximum im sichtbaren Wellenlängenbereich angepasst. In Abbildung 2.2 sind die spektralen Strahldichten eines Schwarzkörpers bei unterschiedlichen Temperaturen dargestellt, wie sie nach dem Planckschen Strahlungsgesetz berechnet werden.

2.2 Grundlegende Interaktionen zwischen elektromagnetischer Strahlung und Materie

Oberflächen von Boden- oder Gesteinsproben verhalten sich nicht nach der idealisierten Vorstellung, die der Theorie eines Schwarzkörpers zugrunde liegt. Vielmehr zeigen sie in der Interaktion mit eS meist diagnostische spektrale Variationen in ihrem Absorptions-/Emissions- oder Reflexionsverhalten, die aus den mineralogischen und partikulären Eigenschaften des Materials resultieren (vgl. Abb. 2.1).

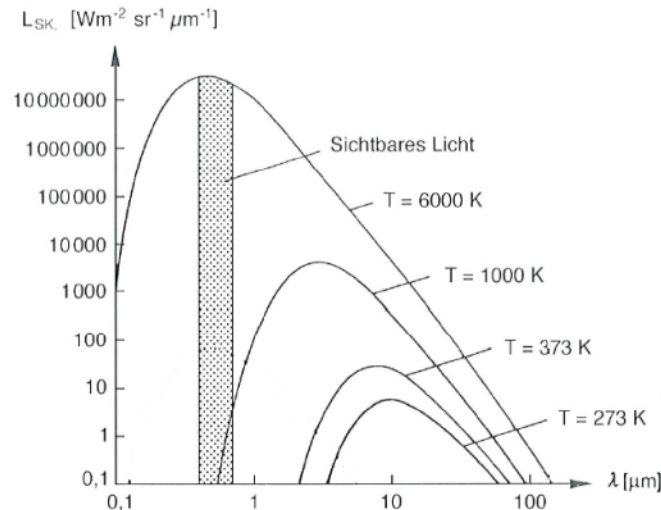


Abbildung 2.2: Spektrale Strahldichten eines Schwarzkörpers bei unterschiedlichen Temperaturen nach dem Planckschen Strahlungsgesetz, verändert aus Albertz (2001).

In den verschiedenen Disziplinen der spektroskopischen Sensorik (wie etwa der aktiven und passiven Labor- und Feld-Spektroskopie oder der hyperspektralen Fernerkundung) nutzt man diese charakteristischen spektralen Merkmale, die sich im Spektrum als Absorptions-/Emissions- oder Reflexionsbanden zeigen, zur Materialidentifikation. Sie werden im Allgemeinen als spektrale *Feature* bezeichnet und im Rahmen dieser Arbeit mit *sF* abgekürzt. Die den Interaktionen zugrunde liegende Energieform, kann auf unterschiedliche Strahlungsquellen zurückgeführt werden (z.B.: Ausstrahlung künstlicher Lichtquellen, solare Ausstrahlung, Wärmestrahlung, etc.). Für die Fernerkundung lassen sich *sF* nur in begrenzten spektralen Bereichen nutzen.

2.2.1 Emission und Reflexion in den Wellenlängenbereichen der Fernerkundung (VNIR-SWIR, MWIR und LWIR)

Eine pedologische oder geologische Fernerkundung ist grundsätzlich abhängig von der Lage der atmosphärischen Fenster, die eine Detektion der emittierten oder reflektierten Strahlung ohne signifikante Abschwächung durch absorbierende atmosphärische Gase erlaubt (vgl. Abb. 2.3). Die Definition der Wellenlängenbereiche im Rahmen dieser Arbeit basiert auf dem Fokus einer fernerkundlichen Anwendung und folgt der Einteilung nach Schowengerdt (2006) für den solar-reflektiven und Salisbury (1998) für den thermalen Wellenlängenbereich. Neben der Lage der atmosphärischen Absorptionsbanden orientiert sich die Einteilung an der Art der jeweils relevanten Strahlungsquelle:

- **VNIR-SWIR** – Solar-reflektiver Wellenlängenbereich: Vom sichtbaren Bereich (*VIS*: 0,4 – 0,7 μm) über das nahe Infrarot (*NIR*: 0,7 - 1,1 μm) bis zum kurzwelligen Infrarot (*SWIR*: 1,1 - 2,5 μm); **Solare Ausstrahlung**
- **MWIR** – Mittelwelliges Infrarot (3 - 5 μm); **Übergangsbereich zwischen solarer Ausstrahlung und thermaler Emission**
- **LWIR** – Langwelliges Infrarot (8 - 14 μm); **Thermale Emission**

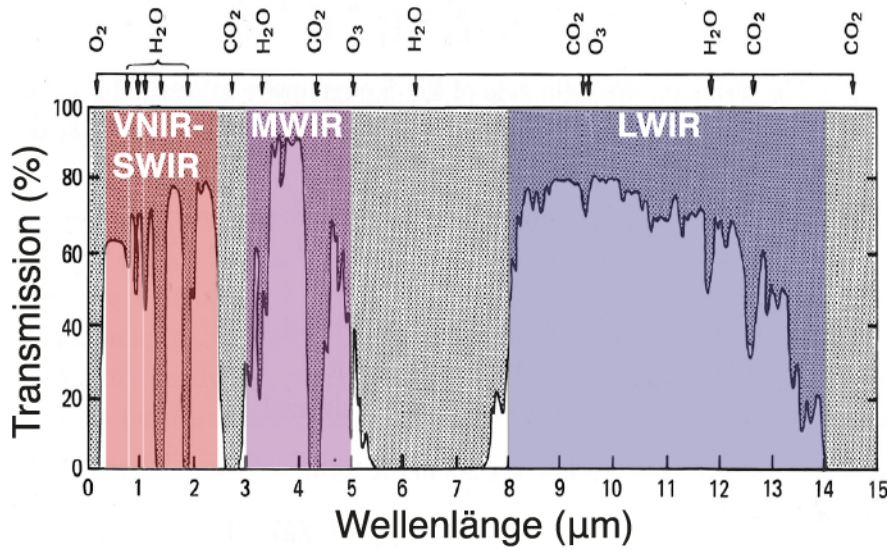


Abbildung 2.3: Möglichkeiten der fernerkundlichen Detektion unter Berücksichtigung der spektralen Transmissionseigenschaften atmosphärischer Gase, verändert aus Lillesand und Kiefer (1994). Definition der Wellenlängenbereiche *VNIR-SWIR*, *MWIR* und *LWIR*.

VNIR-SWIR - Solar-reflektiver Wellenlängenbereich

Im *VIS-NIR-SWIR* oder kurz *VNIR-SWIR* dominiert die Interaktion von Materie mit der *eS* aus der solaren Ausstrahlung, die von der Erdoberfläche teilweise ins Gesichtsfeld des Sensors reflektiert wird. Vor diesem Hintergrund wird dieser Wellenlängenbereich als solar-reflektiv bezeichnet. Die *eS* kann vom Objekt absorbiert (E_α), reflektiert (E_ρ) oder transmittiert (E_τ) werden. Nach dem Energieerhaltungssatz muss die Summe der drei Anteile gleich der spektralen Bestrahlungsstärke ($E_{i,\lambda}$) sein. Daraus ergibt sich für die solar-reflektiven Wellenlängenbereiche ohne die thermische Emission:

$$M_{Solar,\lambda} = E_{i,\lambda} = E_{\alpha,\lambda} + E_{\rho,\lambda} + E_{\tau,\lambda} \quad (2.5)$$

Dividiert man die Gleichung durch $E_{i,\lambda}$ lassen sich daraus die dimensionslosen Materialeigenschaften Absorptionsgrad (α), Reflexionsgrad (ρ) und Transmissionsgrad (τ) ableiten:

$$1 = \alpha + \rho + \tau \quad (2.6)$$

In der Spektroskopie von festen oder partikulären Oberflächen wird im solar-reflektiven Wellenlängenbereich überwiegend mit Reflektanz- oder Absorptionswerten gearbeitet. Die am Sensor empfangene spektrale Strahldichte (L_λ , engl. *at sensor radiance*) wird dazu entweder relativ zu einem Standard mit bekanntem Reflexionsgrad (Reflektanz) gemessen (z.B. mit einem Weißstandard in der Spektroskopie) oder im Fall von Fernerkundungsdaten über eine Atmosphärenkorrektur auf Reflektanzwerte gebracht. Um die Proportionalität zur Materialkonzentration zu gewährleisten, werden die Reflektanzwerte häufig - auf Grundlage des Lambert-Beerschen Gesetzes (vgl. Kap. 2.2.2) - in Absorptionswerte transformiert.

Bereits innerhalb des solar-reflektiven Wellenlängenbereichs ist eine deutliche Abnahme der solaren Einstrahlung mit zunehmender Wellenlängen bemerkbar. Grund dafür ist sowohl die solare Ausstrahlungs-Charakteristik (vgl. Kap. 2.2) sowie die breiten Wasser-Absorptionsbanden der Atmosphäre bei $1,36\ \mu\text{m}$, $1,9\ \mu\text{m}$ und $2,7\ \mu\text{m}$, die ihre unmittelbaren spektralen Nachbarn beeinflussen (Salisbury, 1998). Somit steht im *SWIR* für fernerkundliche Anwendungen sehr viel weniger Energie von der Sonne zur Verfügung als im *VIS* (vgl. Abb. 2.4). Der Effekt verstärkt sich im Jahresgang bei größer werdenden Sonnen-Zenitwinkeln.

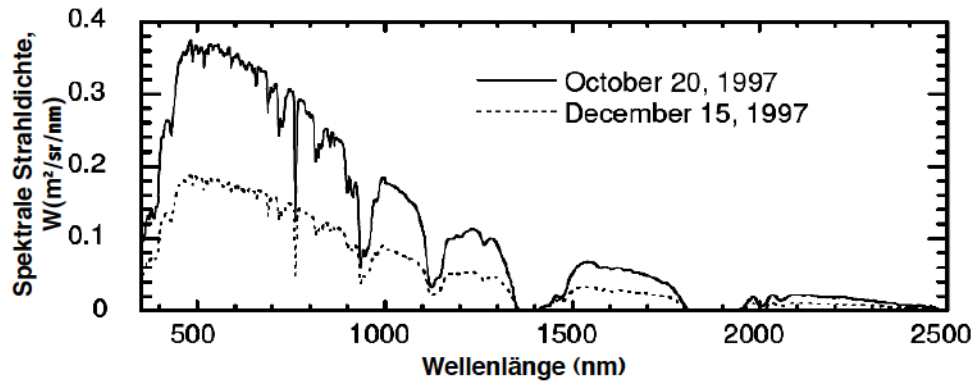


Abbildung 2.4: Solare spektrale Strahldichte an einem klaren, sonnigen Tag im Oktober und im Dezember nahe Washington D.C, nach atmosphärischer Transmission, reflektiert von einem Weißstandard. Beispiel aus Salisbury (1998).

MWIR - Mittelwelliges Infrarot

In Richtung größerer Wellenlängen nimmt mit dem Verlassen des *SWIR* und mit dem Übergang ins *MWIR* der Einfluss der Reflexion der solaren Ausstrahlung an der Erdoberfläche immer mehr ab. Stattdessen gewinnt die von der Erdoberfläche direkt emittierte Wärmestrahlung (thermale Emission) zunehmend an Bedeutung (vgl. Abb. 2.2).

Das *MWIR* stellt den Übergangsbereich zwischen dem solar-reflektiven Wellenlängenbereich und dem langwelligen Infrarot (*LWIR*) dar. Nach Salisbury (1998) lässt sich das *MWIR* wie folgt unterteilen:

3,0 bis 3,5 μm : In diesem Bereich befindet sich der Punkt, an dem die reflektierte und die emittierte Energie für Oberflächen bei Raumtemperatur gleich groß werden können (engl. *crossover-point*). Die Position ist abhängig vom atmosphärischen Zustand, vom Sonnen-Zenitwinkel, sowie von den Eigenschaften der Oberfläche. Wegen der ohnehin niedrigen Energiewerte - aus beiden Quellen - ist dieser Bereich für die Fernerkundung bislang uninteressant.

3,5 bis 4,4 μm : Im Bereich von $3,5\ \mu\text{m}$ bis zum Beginn der großen CO_2 -Bande ($\sim 4,2 - 4,4\ \mu\text{m}$) kann unter gewissen Umständen der Anteil an reflektierter Solarstrahlung in der gemessenen *at-sensor-radiance* bedeutend werden. Glatte, stark spiegelnde Oberflächen wie etwa aus Metall können unter entsprechendem Beobachtungswinkel (z.B.: *hot spot*) ein solches Verhalten zeigen. Außerdem lassen stark reflektierende, diffuse Metalloberflächen (sehr niedrige Emissivität) diesen Effekt erkennen. Diese Materialeigenschaft wird bei passiven Emissions-FTIR-Messungen im *LWIR* zur Abschätzung der Hintergrundstrahlung

genutzt, vgl. Kap. 4.1.1). Die meisten natürlichen Materialien zeigen jedoch niedrige Reflektanzwerte im *MWIR* – selbst Schnee.

4,4 bis 5 μm : Nach der großen CO_2 -Bande, im Bereich von 4,4 bis 5,0 μm , spielt die reflektierte Solarstrahlung für das *MWIR* keine bedeutende Rolle mehr.

Vor diesem Hintergrund kann für nahezu alle pedologischen oder geologischen Oberflächen davon ausgegangen werden, dass die beobachtete *at-sensor-radiance* im Wellenlängenbereich des *MWIR* (3 bis 5 μm) von der thermalen Emission dominiert wird (der solar-reflektive Anteil also vernachlässigbar ist).

Obwohl das *MWIR* im Zuge der spektroskopischen Labor-Messungen mit aufgezeichnet wurde, soll es im Rahmen dieser Arbeit keine wesentliche Rolle spielen. Trotz seines großen spektralen Potentials für die Charakterisierung von Boden- und Gesteinsproben (v.a. für deren organischen Bestandteile) in der Labor-Spektroskopie steht es für Anwendungen der Fernerkundung momentan nur sehr begrenzt zur Verfügung. Für eine pedologische oder geologische Fernerkundung sind dagegen die Wellenlängen des *LWIR* wesentlich besser geeignet.

LWIR - Langwelliges Infrarot

Der Bereich des *LWIR* wird nunmehr hauptsächlich von der Strahlung der thermalen Emission bestimmt. Dabei erreicht die spektrale spezifische Ausstrahlung von Oberflächenmaterialien bei Raumtemperatur (293 K) bei etwa 9.89 μm ihr Maximum und fällt in Richtung des *SWIR* wieder deutlich ab. Abbildung 2.5 veranschaulicht den Verlauf der spektralen Strahldichte eines Schwarzkörpers bei 293 Kelvin zwischen 3 und 16 μm . Die Abbildung zeigt, dass für eine fernerkundliche Erfassung von Objekten im Bereich der Raumtemperatur das *LWIR* sehr viel mehr energetisches Potential bietet als das *MWIR*.

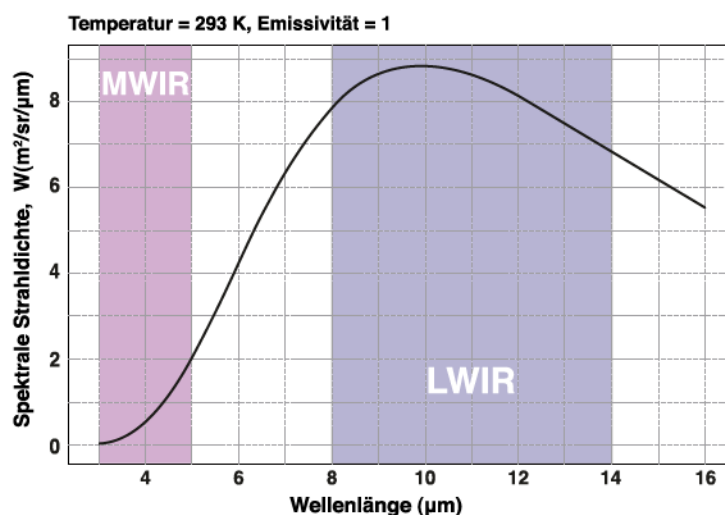


Abbildung 2.5: Spektrale Strahldichte eines Schwarzkörpers bei 293 Kelvin (Raumtemperatur), berechnet nach dem Planckschen Strahlungsgesetz. Farbige unterlegt die spektralen Bereiche des *MWIR* und des *LWIR*.

Die für die thermale Emission benötigte Energie resultiert hauptsächlich aus der Erwärmung durch die Absorption eS aus der solaren Einstrahlung. Die dabei aufgeheizte Erdoberfläche ist

auch nachts noch thermal aktiv und eignet sich dann besonders gut für eine fernerkundliche Erfassung. Ohne die Wirkung der direkten Sonneneinstrahlung werden Reliefeinflüsse im Laufe der Nacht abgeschwächt.

Spektrale Emissivität

Die spektrale spezifische Ausstrahlung eines natürlichen Materials unterscheidet sich grundlegend von der eines Schwarzkörpers. Ein natürliches Material emittiert nur fragmentarisch die Strahlung, die ein Schwarzkörper der gleichen Temperatur emittieren würde und wird daher auch als selektiver Strahler bezeichnet. Die spektrale Strahldichte eines natürlichen Materials ist nicht nur eine Funktion seiner kinetischen Temperatur, sondern auch seiner Materialzusammensetzung. Wie viel Strahlung ein natürliches Material relativ zu einem Schwarzkörper derselben Temperatur emittiert, beschreibt sein Emissionsgrad oder seine Emissivität (ε_λ):

$$\varepsilon(\lambda) = \frac{L_S(\lambda)}{L_{SK}(T, \lambda)} \quad (2.7)$$

wobei $L_S(\lambda)$ die spektrale Strahldichte des Materials und $L_{SK}(\lambda, T)$ die spektrale Strahldichte eines Schwarzkörpers bei gleicher Temperatur ist.

Wie im Reflektanz-Spektrum (Abb. 2.1) zeigt sich auch im Spektrum der Emissivität das materialspezifische, wellenlängenabhängige Verhalten in Form von sF . Sie treten nun dort auf, wo ein Material an bestimmten Wellenlängen weniger Energie emittiert als ein Schwarzkörper derselben Temperatur. Abbildung 2.6 veranschaulicht dies am Beispiel eines Quarz-Spektrums im Wellenlängenbereich von 6 bis 14 μm .

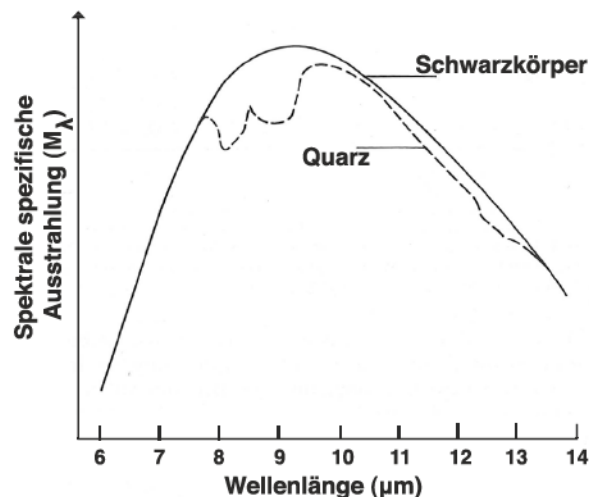


Abbildung 2.6: Spektrale spezifische Ausstrahlung (M_λ) eines Schwarzkörpers und eines selektiven Strahlers (hier Quarz) bei gleicher Temperatur, verändert aus Lillesand und Kiefer (1994).

Das Gesetz von Kirchhoff

Der deutsche Physiker Gustav Robert Kirchhoff erkannte im 19. Jahrhundert, dass im Bereich des Infrarots die spektrale Emissivität eines Objektes dessen spektraler Absorption entspricht. Daraus folgerte er, dass „*gute Absorber auch gute Emittoren und gute Reflektoren schwache Emittoren sind*“:

$$\varepsilon(\lambda) = \alpha(\lambda) \quad (2.8)$$

Er formulierte diesen Erkenntnis im Kirchhoffschen Strahlungsgesetz, wonach die Emissivität (ε) und die Reflexion (R) in komplementärem Zusammenhang stehen:

$$1 = R + \varepsilon \quad (2.9)$$

Im ursprünglichen Sinne gilt das Gesetz für opake Materialien, welche sich in einem thermodynamischen Gleichgewicht befinden. Dies würde voraussetzen, dass sich die Probe selbst in einem isothermen Zustand befindet und gleichzeitig dieselbe Temperatur besitzt wie der Hintergrund, in den sie ausstrahlt. Ein Zustand, der im Labor nur unter hohem Aufwand realisiert werden könnte, für fernerkundliche Anwendungen aber undenkbar wäre.

Nicodemus (1965) und Salisbury et al. (1994) zeigten jedoch, dass für die meisten terrestrischen Materialien - so auch für Gesteine und Böden - diese Einschränkungen nicht relevant sind und das Gesetz von Kirchhoff seine Gültigkeit beibehält. Dadurch ist die Berechnung der Emissivität einer Probe sowohl aus ihrer Reflektanz- als auch aus ihrer Emissions-Messung möglich. Ein sehr praktikabler Umstand für Labormessungen im Wellenlängenbereich des *MWIR* oder *LWIR*, wo oft der Einfachheit halber mit aktiven Systemen (Fourier-Transformations-Infrarotspektrometer, kurz: FTIR-Spektrometer) gearbeitet wird, die über eine interne Strahlungsquelle verfügen. Unter Berücksichtigung der Streustrahlung (Messung mit Integrationskugel, welche direktional-hemisphärische Reflektanz (DHR)-Werte liefert, vgl. Kap. 4.1.3) können Reflektanz-Spektren so mit Werten der direktionalen Emissivität aus passiven Systemen, wie thermalen Feld- oder Laborspektrometern oder thermalen Fernerkundungs-Systemen, verglichen werden.

Zusätzliche Begrifflichkeiten zur thermalen Spektroskopie: *apparent emissivity*, *true emissivity* und *brightness temperature*

Für passive thermale Messungen, wie sie sich bei der thermalen Fernerkundung oder der Emissions-FTIR-Spektroskopie ergeben, wird die Emissivität nach Gleichung 2.7 im Allgemeinen zunächst als „scheinbare“ Emissivität (engl. *apparent emissivity*) bezeichnet. Aus ihr wird durch Korrektur der Hintergrundstrahlung die „wahre“ Emissivität (engl. *true emissivity*) berechnet (vgl. Kap. 4.1.1).

Außerdem tritt im Zusammenhang mit passiven Thermal-Messungen oft der Begriff der Strahlungstemperatur (engl. *brightness temperature* oder auch *spectral temperature*) auf. Die Strahlungstemperatur wird, unter der Annahme $\varepsilon = 1$, aus der gemessenen Strahldichte über die invertierte Planck Formel berechnet und liefert eine fiktive Temperatur als Funktion der Wellenlänge. Sie beschreibt für jede Wellenlänge die Temperatur eines Schwarzkörpers, der mit der

spektralen Strahldichte emittieren würde, wie sie vom Objekt selbst gemessen wurde. Sie ist immer kleiner als die wahre Temperatur des Objekts und eine rein hypothetische Veranschaulichung, da einem Objekt immer nur eine Temperatur eigen sein kann. Die Strahlungstemperatur zeigt bereits markante spektrale Differenzen auf. Aus ihr lassen sich dadurch oft schon sF ableiten, ohne zusätzliche Parameter (z.B.: kinetische Temperatur, Hintergrundstrahlung, etc.) der Messung zu kennen.

Abschließend zu diesem Abschnitt sei noch erwähnt, dass die hier getroffenen Definitionen der Wellenlängenbereiche, angelehnt an die Fernerkundung, nicht vollständig auf die aktive Labor-Spektroskopie übertragbar sind. Da auch hier im Bereich des *MWIR* und des *LWIR* entsprechende künstliche Strahlungsquellen eingesetzt werden, wird entsprechend die Reflexion der Probe gemessen. Die spektralen Definitionen weichen teilweise von der Nomenklatur anderer Publikationen ab. Wissenschaftliche Arbeiten aus dem Bereich der Infrarotspektroskopie oder der Chemometrik bezeichnen generell den gesamten Wellenlängenbereich von 2,5 bis 25 μm als mittleres oder klassisches Infrarot (*MIR*, engl. *midinfrared*).

2.2.2 Wechselwirkungen auf atomarer und molekularer Ebene

Die Präsenz von sF in einem Spektrum basiert grundsätzlich auf Übergangsprozessen zwischen den diskreten Energieniveaus in den Atomen und Molekülen der Materie. Ein spezifischer Chemismus zeichnet sich durch charakteristische spektrale Eigenschaften aus. Unabhängig von der Art der Strahlungsquelle, aus der die Interaktion zwischen Energie und Materie resultiert, sind diese Übergangsprozesse sowohl für die solar-reflektiven (Absorption/Reflektanz) als auch für die thermalen Wellenlängen (Emission) eines Spektrums präsent.

Die physikalische Grundlage, auf der diese Wechselwirkungen beruhen, beschreibt die Quantenmechanik: Danach wird elektromagnetische Strahlung nur in diskreten Energiepaketen (Lichtquanten) von einem Material absorbiert bzw. emittiert. Die Energie des Lichtquantums (Photonenenergie) entspricht dabei genau dem Unterschied der Energieniveaus ($|\Delta E|$) der Atome in den chemischen Verbindungen.

Da die Photonenenergie (q) und die Frequenz (ν) bzw. die Wellenlänge (λ) in direktem Zusammenhang stehen ($q = |\Delta E| = h\nu = hc/\lambda$), haben Absorptions- bzw. Emissionsprozesse einen selektiven Effekt auf das Spektrum und eignen sich zur qualitativen und quantitativen Analyse von Materialinhaltsstoffen (Irons et al., 1989).

Das spektrale Verhalten von Materie wird generell durch drei Formen von Übergangsprozessen in den Energielevels beschrieben: Rotations-, Vibrations-, sowie Elektronenübergangsprozesse. Da sich die Möglichkeit der Rotation auf Gasmoleküle beschränkt, wird auf diese Form im Folgenden nicht weiter eingegangen.

Energie-Übergangsprozesse durch Vibrationen im LWIR, MWIR, und SWIR

Die Absorption bzw. Emission von Photonen kann Energie-Übergangsprozesse in Form von Vibrationen in den Atomen und Atomgruppen der Molekülverbindungen anregen. Diese zeigen sich als periodisch auftretende, mechanische Schwingung und werden in Form von elektromagnetischer Energie für die Fernerkundung detektierbar. Drei Ausprägungsformen der Vibrations-

Schwingungen sind möglich: Fundamental- oder Grund-Schwingungen (engl. *fundamentals*), Ober-Schwingungen (engl. *overtones*) und Kombinationen (engl. *combination tones*):

Im Wellenlängenbereich des *LWIR* treten hauptsächlich die molekularen Fundamental-Schwingungen auf. Diese erzeugen starke Absorptions- bzw. Emissionsbanden, die sich im Spektrum als markante *sF* mit hohem spektralem Kontrast zeigen (vgl. Abb. 2.7). Im *MWIR* und *SWIR* treten dagegen nur noch deren Ober-Schwingungen und Kombinationen auf. Entsprechend breit, oft auch von Überlagerungen geprägt, zeigen sich besonders im *SWIR* relativ wenige *sF* mit sehr viel geringerem spektralem Kontrast (Hapke, 2005; Stenberg und Viscarra-Rossel, 2010).

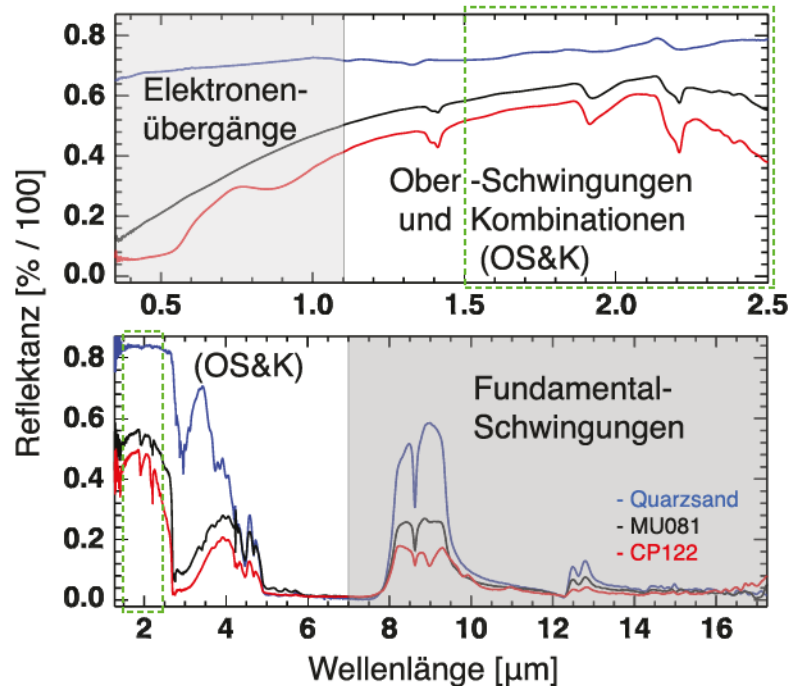


Abbildung 2.7: Unterschiede im spektralen Kontrast von Boden-Feature im solar-reflektiven (ASD-Spektren) und im thermalen Wellenlängenbereich (DHR-Spektren) am Beispiel zweier Böden (MU081 und CP122) sowie für reinen Quarzsand. Der grün gestrichelte Bereich markiert den Überlappungsbereich der beiden Systeme.

Energie-Übergangsprozesse durch Elektronen im VNIR und im UV

Die Absorption von Photonen regt innerhalb der Atome oder zwischen benachbarten Atomen Elektronenübergänge an, die wiederum Änderungen in den Energieniveaus der Elektronen nach sich ziehen. Um Elektronenübergangsprozesse zu erzeugen, wird mehr Energie benötigt als für Übergangsprozesse durch Vibrationen. Sie zeigen sich deshalb hauptsächlich im *VNIR* und im ultravioletten (*UV*) Spektralbereich (Hapke, 2005; Hunt, 1980). Die Emission von Photonen spielt in diesem Wellenlängenbereich keine große Rolle mehr für die pedologische und geologische Fernerkundung, da entsprechend hohe Temperaturen für den Großteil terrestrischer Oberflächenmaterialien nicht gegeben sind (eine mögliche Ausnahme wäre z.B. flüssige Lava).

Lambert-Beersches Gesetz

Wie viel der eS in den jeweiligen Wellenlängen absorbiert werden kann, ist von der Konzentration der absorbierenden Substanz im Material und den stoffspezifischen Absorptionseigenschaften abhängig. Diese kommen im Extinktionskoeffizienten (ϵ_λ) oder bei vernachlässigbarem Streuanteil im Absorptionskoeffizienten (α_λ) zum Ausdruck. Dieser Zusammenhang wird vom Lambert-Beerschen Gesetz beschrieben und bildet die Grundlage der quantitativen Analytik in der Spektroskopie. Das Gesetz beschreibt in seiner klassischen Form den Zusammenhang zwischen der Abschwächung der Strahlungsintensität beim Durchgang durch eine absorbierende Substanz und deren Konzentration:

$$I_\lambda = I_{0,\lambda} \cdot e^{(-\epsilon_\lambda \cdot l \cdot c)} \quad (2.10)$$

wobei I_λ : spektrale Strahldichte des transmittierten Lichts; $I_{0,\lambda}$: spektrale Strahldichte des einfallenden Lichts; ϵ_λ : molarer, dekadischer Extinktionskoeffizient [$\text{mol} \cdot \text{cm}^{-1}$]; l : Weglänge des Lichts durch die Probe in [cm]; c : Konzentration der absorbierenden Moleküle [$\text{L} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$].

Das Gesetz von Lambert-Beer findet in seiner ursprünglichen Form Anwendung bei Transmissions-Messungen von Flüssigkeiten. Für Reflexions-Messungen an Feststoffen ist dieser Zusammenhang nur noch näherungsweise proportional (Kessler, 2006).

2.3 Besonderheiten der Interaktionen bei Festkörpern (pedologische und geologische Oberflächen) unter Berücksichtigung ihrer makroskopischen Eigenschaften

Das spektrale Verhalten von Boden- oder Gesteinsproben wird nicht einzig von ihrem Chemismus bestimmt. Die physische Struktur ihrer Materialien (makroskopische Ebene) bezieht Streueffekte mit ein, die deren spektralen Charakter zusätzlich beeinflussen. Eine besondere Rolle spielt dabei die Interaktion am Übergangsbereich zwischen Materialoberfläche und dem für die Messung genutzten Medium. Im Folgenden werden die spektralen Phänomene von Festkörpern (pedologische und geologische Oberflächen) beschrieben, wie sie im Zusammenspiel makroskopischer und molekularer Effekte bei Transmissions-, Emissions- bzw. Reflexions-Messungen in Erscheinung treten.

2.3.1 Transmission bei Festkörpern

Im Labor stellen Transmissions-Messungen eine beliebte Methode dar, um den Chemismus von Festkörpern zu bestimmen, da hierbei ein Messaufbau gewählt werden kann, der sämtliche Streueffekte ausschließt. Die Probe wird dazu durch Mahlen auf eine Korngröße gebracht, die kleiner ist als die Wellenlänge der transmittierten eS . Das homogenisierte Probenmaterial wird außerdem in eine Matrix aus Kaliumbromid-Pulver (KBr) gebettet und in Tabletten-Form gepresst. Der Brechungsindex (s.u.) der Probe und der von KBr sind sich sehr ähnlich. Die gemessene Transmission (T) ist bei dieser Messmethode nur noch vom Absorptionskoeffizienten (α) und der Schichtdicke der Tablette (t) abhängig (Salisbury et al., 1987; Vincent und Hunt, 1968):

$$T = e^{-\alpha t} \quad (2.11)$$

Transmissions-Messungen sind in dieser Form prädestiniert für eine quantitative Analytik von Feststoffen. Abbildung 2.10 (A1) und (A2) zeigen die Transmissions-Spektren von Quarz bzw. Calcit nach der beschriebenen Messmethode. Das Verfahren liefert Spektren, deren Absorptionsbänder (Wellenlängenpositionen) in direktem Zusammenhang mit den beschriebenen molekularen Vibrations-Schwingungen stehen (vgl. Kap. 2.2.2).

Vor einer Anwendung zur Bodenanalytik warnen White (1964); Ketelaar und Van der Elsen (1959) wegen der Gefahr einer Reaktion der Bodenprobe mit der Matrix des Kaliumbromid durch Ionenaustausch. Außerdem ist der Präparationsaufwand bei dieser Methode enorm hoch (Nguyen et al., 1991).

Für eine Übertragung auf Fernerkundungsdaten sind Transmissions-Messungen dagegen nicht geeignet, was insbesondere für partikuläre Oberflächen gilt (Salisbury et al., 1987; Vincent und Hunt, 1968). Abbildung 2.10 macht die spektrale Diskrepanz deutlich, die zwischen Transmissions- und Reflexions-Messungen auftritt. Aus diesem Grund werden im Folgenden Emissions- bzw. Reflexions-Messungen im Vordergrund stehen.

2.3.2 Emission und Reflexion bei Festkörpern

Eine geologische oder pedologische Fernerkundung basiert auf Emissions- bzw. Reflexions-Messungen, die zwangsläufig Streueffekte mit sich bringen, welche die spektrale Erscheinung einer Oberfläche merklich beeinflussen. Gesteuert wird das spektrale Verhalten bei Festkörpern maßgeblich von ihren optischen Konstanten, dem Brechungsindex (n') und dem Extinktionskoeffizienten (κ), die im komplexer Brechungsindex (\tilde{n}) wie folgt definiert sind:

$$\tilde{n} = n' + i\kappa \quad (2.12)$$

Die Größe des Brechungsindex steht dabei für die Geschwindigkeit mit der sich die eS durch das Material bewegt. κ wird von den Prozessen der molekularen Vibrations-Schwingungen (vgl. Kap. 2.2.2) gesteuert und beschreibt die exponentielle Schwächung (Schwingungs-Dämpfung) der eS beim Durchlaufen des Materials (Hunt, 1980; Salisbury et al., 1987). κ steht mit dem Absorptionskoeffizienten (α) in folgender Beziehung:

$$\alpha = (4\pi/\lambda)\kappa \quad (2.13)$$

κ wird im Bereich der Optik, anders als in der Chemie (vgl. ϵ_λ innerhalb des Lambert-Beerschen Gesetzes 2.2.2) dimensionslos verwendet. Sowohl der Realteil als auch der Imaginärteil von \tilde{n} sind wellenlängen- (Dispersion) und materialabhängig (Hunt, 1980).

Streuprozesse an partikulären Oberflächen

Bei partikulären Oberflächen von Böden wird prinzipiell zwischen zwei Streuprozessen unterschieden - der Oberflächenstreuung und der Volumenstreuung. Vincent und Hunt (1968) definieren die Strahlengänge dieser Streuprozesse wie folgt:

- **Oberflächenstreuung:** Strahlung die an der Kornoberfläche reflektiert wird, kann sich als einfache Oberflächenstreuung (engl. *single surface scattering*; Strahlengang: 1, 2 in Abb. 2.8) oder als multiple Oberflächenstreuung (engl. *multiple surface scattering*; Strahlengang: 3) zeigen.
- **Volumenstreuung:** Strahlung, die ins Innere des Korns gebrochen und von dort zurückgestreut wird (Strahlengang: 4 und 5 in Abb. 2.8).

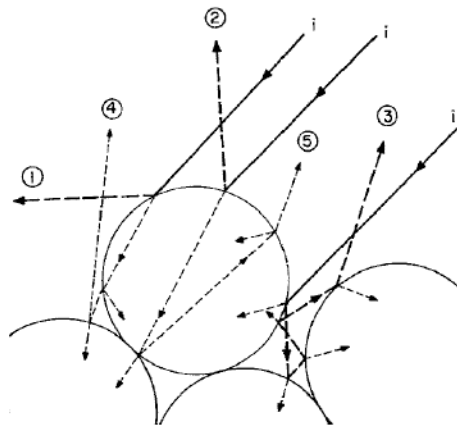


Abbildung 2.8: Unterschiedliche Strahlengänge nach der Theorie der Oberflächenstreuung (1–3) und der Volumenstreuung (4 und 5), aus Vincent und Hunt (1968).

Für die Oberflächenstreuung (hier spiegelnde Reflexion, ρ_s) kann der Einfluss der optischen Konstanten mithilfe der Fresnelschen Formel (2.14) beschrieben werden, wenn die Kornoberfläche im Verhältnis zur Wellenlänge entsprechend groß ist und somit von einer planparallelen Interaktion ausgegangen wird.

$$\rho_{s,\lambda} = \frac{(n'_\lambda - 1)^2 + \kappa_\lambda^2}{(n'_\lambda + 1)^2 + \kappa_\lambda^2} \quad (2.14)$$

Dringt die Strahlung dagegen im Fall der Volumenstreuung ins Korn ein, hängt die zurückgestreute Strahlung von der Transmission des Korns nach Gleichung 2.11 ab. Wobei in diesem Fall t durch d ersetzt wird, was hier die mittlere Weglänge eines Photons durchs Korn beschreibt und in der Größenordnung des Korndurchmessers liegt (Hunt, 1980).

Oberflächenstreuung und Volumenstreuung haben einen gegenläufigen Effekt auf die spektrale Signatur der Probe (Abb. 2.10): Absorptionsbanden erzeugen bei der Oberflächenstreuung Emissions-Minima bzw. Reflektanz-Maxima. Bei der Volumenstreuung dagegen erzeugen Absorptionsbanden Emissions-Maxima und Reflektanz-Minima (Vincent und Hunt, 1968; Salisbury und Wald, 1992).

Nach Nash et al. (1993) werden Oberflächenstreuung und Volumenstreuung bei Silikate für die folgenden Wellenlängenbereichen unterschieden:

- 4 – 7 μm : Silikate werden in diesem Wellenlängenbereich in der Regel von der Volumenstreuung bestimmt.
- 7 – 9,5 μm : In diesem Bereich dominiert die Oberflächenstreuung, mit Ausnahme des Christiansen-Frequenz-Feature, das im nächsten Abschnitt beschrieben wird.
- 9,5 – 12 μm : Hier hängt der vorherrschende Streuungsprozess stark von der Korngröße des Materials ab. Bei sehr feinem Material taucht in diesem Wellenlängenbereich plötzlich ein sF auf, welches wiederum durch Volumenstreuung erzeugt wird, das Transparenz-Feature (Salisbury und Walter, 1989). Dieses stark texturabhängige sF wird im Rahmen des Kapitels 2.3.2 diskutiert.
- 12 – 25 μm : Innerhalb dieses Wellenlängenbereichs werden Silikaten wieder von der Oberflächenstreuung beeinflusst, wobei ab $\sim 12\text{--}15 \mu\text{m}$ ein Instrument mit hohem SNR nötig ist, um in diesem Wellenlängenbereich einen brauchbaren spektralen Kontrast zu erzeugen.

Christiansen-Frequenz-Feature (CFF) und Reststrahlenbänder (RB)

Im Wellenlängenbereich des *LWIR* zeigt sich der dispersive Charakter der optischen Konstanten besonders eindrucksvoll. So treten an Wellenlängen, an denen sich die Werte für n' des Materials denen des umgebenden Mediums annähern, die so genannten Christiansen-Frequenz-Feature (*CFF*) auf (vgl. Abb. 2.10B1). An diesen Stellen ist die Streuung minimal und der Teil der eS , der in das Material eindringen kann, steigt sprunghaft an (Volumenstreuung). Die maximale Transmission erzeugt ein Maximum an Emission bzw. ein Minimum an Reflektanz. (Salisbury et al., 1987). Die Wellenlängenpositionen der *CFF* sind demzufolge auch Funktionen des Materials und können für die Spektroskopie/Fernerkundung diagnostische Informationen über die mineralogische Zusammensetzung liefern (Nash et al., 1993).

Abbildung 2.9A veranschaulicht den Einfluss von n' auf das Emissionsverhalten am Beispiel einer polierten Quarzplatte nach Studien von Wenrich und Christensen (1996) und Spitzer und Kleinmann (1961). Wellenlängen, an denen sich n'_{Quarz} und $n'_{\text{Luft}} (\sim 1)$ nahekomen, zeigen *CFF* im Spektrum, mit minimalen Reflektanz- und maximalen Emissionswerten bei $\sim 7,5 \mu\text{m}$ und $\sim 12,3 \mu\text{m}$ (vgl. Abb. 2.9C).

Innerhalb der kurzen Wellenlängenintervalle, in denen κ aufgrund der molekularen Fundamental-Schwingungen (für Quarz durch die Si-O Bindungen) auf ein Maximum ansteigt (vgl. Abb. 2.9B), erfährt n' eine abrupte Änderung auf der kurzwelligen Seite dieser starken Absorptionsbande (anomale Dispersion). Dieses Verhalten ist typisch für Minerale wie Silikate oder Carbonate, die in diesen so genannten Reststrahlenbändern (*RB*), von der Oberflächenstreuung gesteuert, maximale Reflektanz (bzw. minimale Emission) zeigen (Salisbury et al., 1987).

Silikate zeigen ihre *RB* in der Regel im Wellenlängenbereich zwischen 7,5 und 12,3 μm (beiderseits begrenzt von den *CFF*). Innerhalb dieser *RB* sind sF diagnostisch für die mineralogische Zusammensetzung, was insbesondere für Festgestein sowie für partikuläres Material grober Textur gilt (Nash et al., 1993). Quarz offenbart hier seine typische Emissivitäts-Doppelbande (engl. *emissivity-doublet*) mit einem Emissivitäts-Maximum bei 8,63 μm . Eine zweite Doppelbande mit

geringerer Ausprägung ist meist zwischen $\sim 12,3$ und $\sim 14 \mu\text{m}$ zu erkennen (auch dieser Bereich wird wieder als *RB* bezeichnet). Abbildung 2.9 zeigt hier eine vereinfachte Darstellung der Ergebnisse nach Wenrich und Christensen (1996), die den außergewöhnlichen Strahlengang nicht berücksichtigt, was die geringen Abweichungen der zweiten Doppelbande im Emissionsspektrum erklärt.

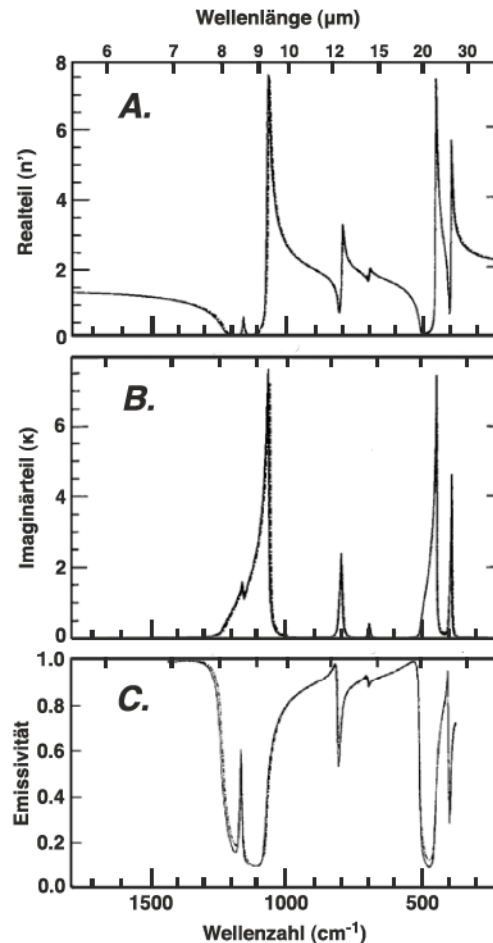


Abbildung 2.9: Realteil (A) und Imaginärteil (B) des Brechungsindex, sowie die daraus berechneten Werte der Emissivität für Labormessungen eines polierten Quarz-Handstücks, verändert aus Wenrich und Christensen (1996)

Effekte durch den Einfluss der Korngröße

Während die Wellenlängenpositionen der *CFE* unabhängig von der Korngröße sind (Salisbury et al., 1987), wird der Bereich der *RB* davon erheblich beeinflusst (vgl. Abb. 2.10B1). Dabei wird allgemein beobachtet, dass der spektrale Kontrast in den *RB* mit abnehmendem Korngrößendurchmesser (und zunehmender Porosität) unterdrückt wird (Wald und Salisbury, 1995; Greenhagen und Paige, 2006), wobei die *sF* innerhalb der *RB* diagnostisch für die mineralogische Zusammensetzung des Materials bleiben (Nash et al., 1993).

Die Reduktion des spektralen Kontrastes in den *RB* bei abnehmender Korngröße ist typisch für Silikate und ist nach Cudahy (2000) wie folgt zu erklären: Ist der Korngrößendurchmesser groß

im Vergleich zur Wellenlänge, ist auch der Anteil der Oberflächenstreuung groß. In diesem Fall dominiert die einfache Oberflächenstreuung (Strahlengang: 1, 2 in Abb. 2.8), im *LWIR* zeigen sich dann die prominenten *RB* in starker Ausprägung. Mit abnehmender Korngröße gewinnt die multiple Oberflächenstreuung (Strahlengang: 3) immer mehr an Einfluss. Durch die zunehmende Anzahl von Interaktionen (Reflexionen), die durch die vergrößerte spezifische Oberfläche der Probe an nun mehr Korngrenzen möglich werden (engl. *cavity effect*), wird der spektrale Kontrast in den *RB* reduziert.

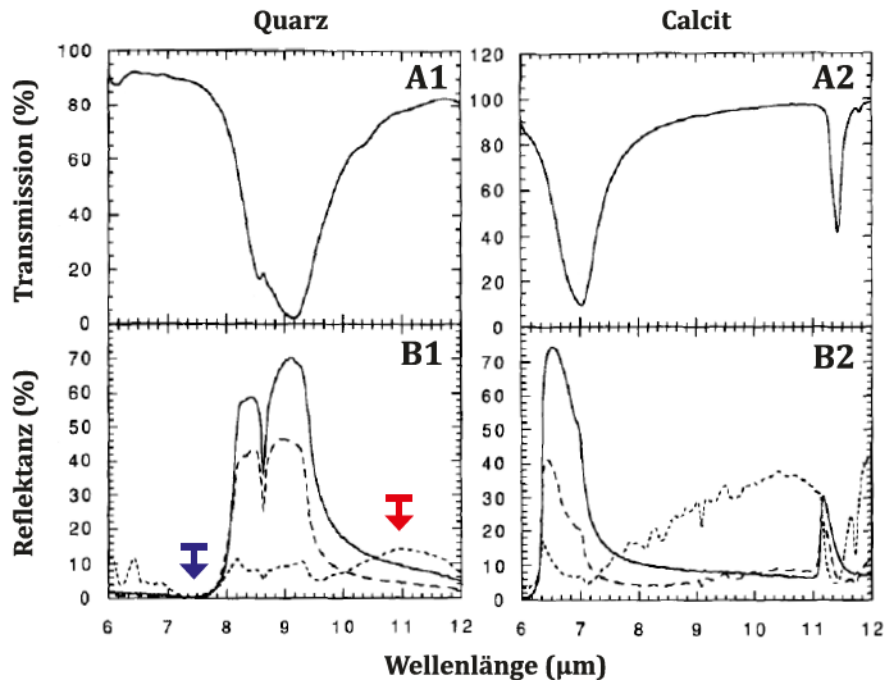


Abbildung 2.10: Transmissions- (KBr-Tabletten) und Reflektanz-Spektren (DHR-Messung) von Quarz (A1 bzw. B1) und Calcit (A2 bzw. B2). Reflektanz-Spektren repräsentieren polierte Handstücke (durchgezogen) sowie partikuläres Material in den Korngrößen 75-250 μm (gestrichelt) und 0-75 μm (gepunktet). Der blaue Pfeil markiert die Position des Christiansen-Frequenz-Features, der rote das Transparenz-Feature, verändert aus Salisbury und Wald (1992)

Der spektrale Kontrast der *RB*, der von den Oberflächen-Streuungsprozessen gesteuert wird, zeigt sich bei sehr kleinen Korngrößen stark dezimiert, das Reflektanz-Maximum bleibt jedoch erhalten. Im Wellenlängenbereich zwischen $\sim 9,5$ und ~ 12 μm macht sich bei sehr feinem Material wieder der Einfluss der Volumenstreuung stark. So taucht in Spektren von partikulärem Material, das von Korngrößen im Bereich von 0 – 75 μm dominiert wird, ein zusätzliches *sF* auf, das Transparenz-Feature (engl. *transparency feature*) (Salisbury und Walter, 1989). Die extrem feinen Partikel werden in diesem Wellenlängenbereich *optisch dünn* und zeigen für Quarz ein Reflektanz-Maximum bei etwa 11 μm (roter Pfeil aus Abb. 2.10B1). Analog zum *CCF* ist auch die Wellenlängenposition des Transparenz-Features materialabhängig und damit ein potentieller Indikator für die mineralogische Zusammensetzung (Salisbury und Walter, 1989).

Wird sehr feines Material (wie etwa pulverförmige Mineralproben) als gepresste Oberfläche gemessen, wird dadurch der spektrale Kontrast wieder erhöht. Sowohl in der Reflexion als auch in der thermalen Emission kann dieser Effekt auf eine effektive Zunahme der Korngröße zurückgeführt werden (Wald und Salisbury, 1995).

Für den solar-reflektiven Wellenlängenbereich verhält sich der Einfluss der Korngröße auf die bidirektionale Reflektanz wie folgt: Mit abnehmender Korngröße wird auch hier der spektrale Kontrast der sF im *VNIR-SWIR* reduziert, wobei das Niveau der Reflektanz (engl. *overall reflectance*) ansteigt (Hunt, 1980; Baumgardner et al., 1985; Ben-Dor et al., 1999). Dieses Verhalten gilt für transparente Materialien, wozu die meisten Silikate im *VNIR-SWIR* zählen. Opake Materialien verhalten sich gegenläufig (Irons et al., 1989).

2.4 Spektrale Charakteristika von Bodenparametern

Das Spektrum eines Bodens wird von seinen Hauptbestandteilen, der mineralischen und organischen Bodensubstanz sowie dem im Porenvolumen eingelagerten Wasser bestimmt. Neben diesen drei chemischen Faktoren wird das Spektrum zusätzlich von physischen Faktoren überlagert, wobei die Korngröße dabei den größten Einfluss hat (Ben-Dor et al., 2008). Für eine Betrachtung im Rahmen der Feldspektroskopie oder der abbildende Spektroskopie spielt außerdem noch die Form der Geländeoberfläche (Bodenrauigkeit) eine bedeutende Rolle.

In der Pedologie werden die Eigenschaften von Bodenoberflächen grundsätzlich über die Größen ihrer Bodenparameter (z.B.: Gehalt an organischem Kohlenstoff, Gehalt an Eisenoxiden, Stickstoffgehalt, Korngrößenverteilung oder Textur, etc.) ausgedrückt. Die Zusammenhänge zwischen Bodenparametern und den spektralen Signaturen von Böden sollen im Folgenden für die Wellenlängenbereiche des *VNIR-SWIR* und des *LWIR* dargestellt werden.

2.4.1 *VNIR-SWIR*

Ein Bodenspektrum offenbart im Wellenlängenbereich des *VNIR-SWIR* Informationen zu chemischen und physischen Bodenparametern. So lässt sich beispielsweise organisches Material über den Anstieg der Reflektanz im *VNIR* erfassen (Ben-Dor et al., 1997), was aber durch den vergleichsweise starken Effekt von eisenhaltigen Mineralen überlagert werden kann. Eisenoxide (wie Hämatit) oder Eisenhydroxide (wie Goethit) sind typische Bodenminerale arider und semiarider Gebiete und zeigen gleich mehrere diagnostische sF im *VNIR* (Hunt et al., 1971). Diese sF sind spektral extrem dominant und bestimmen in der Regel ein Bodenspektrum im *VNIR*.

Sind die sF im *VNIR* noch sehr breit und flach, zeigen sie sich im *SWIR* spektral sehr viel diskreter (schmalbandiger) (vgl. Abb. 2.11). Drei markante Wasser-Absorptionsbanden, bei $1,4\ \mu\text{m}$, $1,9\ \mu\text{m}$ und $2,8\ \mu\text{m}$, werden vom hygroskopischen Wassergehalt im Boden (adsorbiertes Bodenwasser) gesteuert. Die Absorptionsbande bei $1,4\ \mu\text{m}$ resultiert dabei aus den Ober-Schwingungen von OH-Bindungen (Whiting et al., 2004). Außerdem lassen sich im *SWIR* diagnostische sF von Tonmineralen wie Kaolinit, Montmorillonit oder Illit (Hunt und Salisbury, 1970; Chabrilat et al., 2002), und Carbonaten wie Calcit oder Dolomit (Hunt und Salisbury, 1971) sowie von trockener organischer Substanz wie Zellulose oder Lignin (Rodgers und Cudahy, 2009) erkennen.

Physische Bodenparameter, wie die Bodentextur zeigen hingegen keine diagnostischen sF an bestimmten Wellenlängenpositionen. Sie beeinflussen das Niveau der Reflektanz über das gesamte Spektrum (vgl. Kap. 2.3.2).

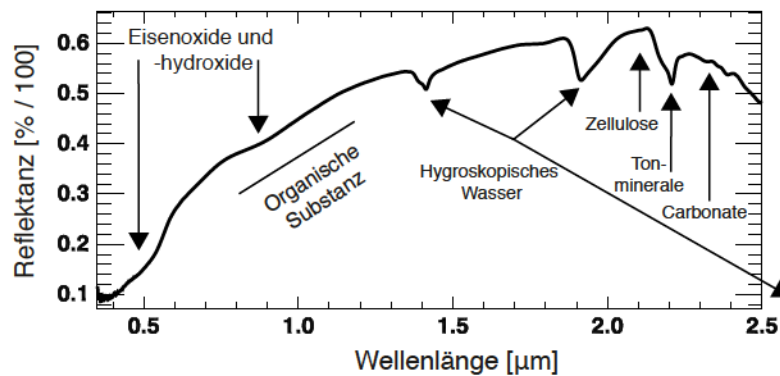


Abbildung 2.11: Typische Bodenparameter im Wellenlängenbereich des VNIR-SWIR am Beispiel eines ASD-Laborspektrums einer luftgetrockneten Bodenprobe aus dem Untersuchungsgebiet Mullewa

2.4.2 LWIR

Im Wellenlängenbereich des LWIR zeigen sich mehrere markante sF im Bodenspektrum, die vor allem auf der Dominanz der molekularen Fundamental-Schwingungen der Si-O Bindungen beruhen (vgl. Abb. 2.1). Sie sind überwiegend auf anorganische Bodenparameter zurückzuführen, beinhalten aber auch einige organische Informationen. Mineralische Böden zeigen für gewöhnlich einen sehr hohen Quarzanteil in ihrer Sand- und Schluff-Fraktion, da sich Quarz chemischen und physikalischen Verwitterungsprozessen sehr erfolgreich widersetzt und insbesondere in alten Böden arider und semiarider Gebiete reichlich vorhanden ist (Hunt und Salisbury, 1970; McKenzie et al., 2004).

Quarz hat einen starken spektralen Effekt auf den Bereich des LWIR und dominiert darin in der Regel den Verlauf eines Bodenspektrums (Salisbury und D'Aria, 1992b). Aber auch andere Bodenminerale sind im LWIR spektral aktiv, wie die Spektren aus Abbildung 2.12 veranschaulichen. So zeigen sich innerhalb der RB typische Tonminerale (Kaolinit, Montmorillonit und Illit), die Si-O Bindungen in ihren charakteristischen Bauelementen (SiO_4 -Tetraeder) tragen. Auch eisenhaltige Minerale und Carbonate präsentieren sF im LWIR (wobei sich das Fundamental-Feature von Calcit zwischen 6 und 7 μm befindet, vgl. Abb. 2.10).

Das LWIR birgt außerdem vielseitige spektrale Merkmale zur Bodentextur. In diesem Zusammenhang sei darauf hingewiesen, dass bei der Auswahl der Minerale aus Abbildung 2.12 auf Einheitlichkeit geachtet wurde. Die dargestellten Spektren wurden von möglichst grob texturierte partikulären Mineralproben ausgewählt. Die Spektren der Tonminerale, die naturgemäß als pulverförmige Mineralproben vorliegen, stellen Proben in gepresstem Zustand dar, um den spektralen Charakter von grob texturiertem Material zu simulieren (vgl. Kap. 2.3.2).

Organische Bestandteile des Bodenmaterials sind in den LWIR-Spektren dagegen nur schwer mit dem bloßen Auge zu erkennen. Sie zeigen sich hauptsächlich im MWIR, was Abbildung 2.13 verdeutlicht. Die Abbildung stellt eine Zusammenfassung der Möglichkeiten in der Spektroskopie für die pedologische Analytik nach Viscarra-Rossel et al. (2006) dar. Bornemann et al. (2008, 2010) zeigen, dass auch der für die Fernerkundung relevantere Bereich des LWIR spektrale Merkmale organischer Bodenbestandteile offenbart (vgl. Tab. 2.1).

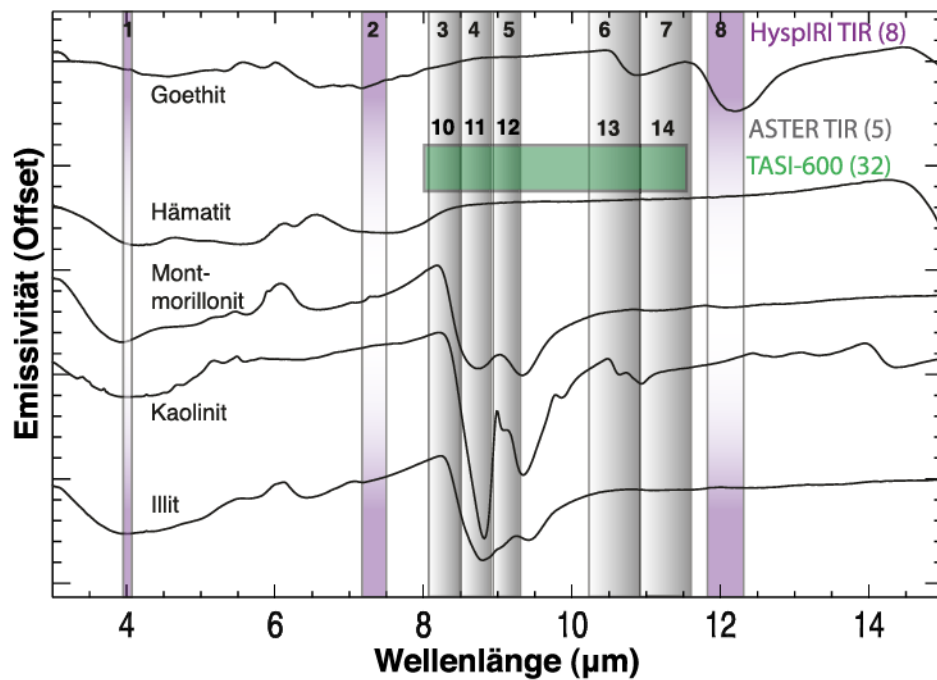


Abbildung 2.12: Spektrale Signaturen aus der ASTER-Spektralbibliothek (Baldrige et al., 2009) für typische Minerale arider und semiarider Böden im *MWIR* und im *LWIR*. Die Auswahl beschränkt sich auf grob texturierte bzw. gepresste (simuliert die grobe Textur) Mineralproben. Farblich unterlegt sind die spektralen Charakteristika der Sensoren: ASTER, HySPIRI und TASI-600.

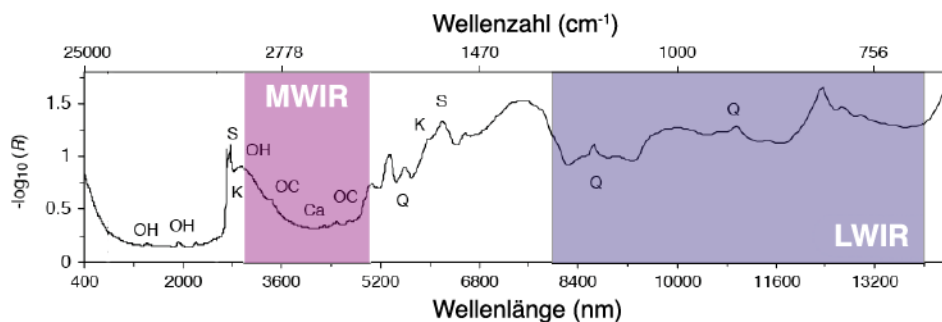


Abbildung 2.13: Repräsentatives Bodenspektrum im *VNIR-SWIR-MWIR-LWIR*. Darin markiert die *sF* für Quarz (Q), organische Verbindungen (OC), Calzit (Ca), Kaolinit (K), Smektit (S) sowie OH-Feature von freiem und gebundenem Wasser, verändert aus Viscarra-Rossel et al. (2006).

Org. Verbindung	sF (μm)	sF (cm^{-1})	Quelle:
carboxylic acids	7,01	1427	Rumpel et al. (2001)
aliphatic CH	7,09	1410	Solomon et al. (2005)
lignin	7,35 – 7,46	1360 -1340	
hydroxylic C–O–H	7,58	1320	Zimmermann et al. (2007)
phenols	7,14; 7,87	1400; 1270	
carboxylic acids	8,0; 8,26	1250; 1210	Solomon et al. (2005)
aliphatic OH	8,33; 8,93	1200; 1120	Haberhauer et al. (1998)
polysaccharides	8,62	1160	Rumpel et al. (2001)
cellulose C–O	9,26 – 10,0	1080 – 1000	Solomon et al. (2005)
cellulose C–O	9,71	1030	
aromatic C=C; C–H	11,49	870	Tatzber et al. (2007)
aromatic C=C; C–H	12,05 – 13,7	830 – 730	Smidt und Meissl (2007)

Tabelle 2.1: Wellenlängenpositionen spektral aktiver organischer Verbindungen in Böden. Zusammenfassung aus Bornemann et al. (2008, 2010) für das *LWIR* (hier bereits ab 7 μm).

Kapitel 3

Das Untersuchungsgebiet Mullewa

Das Untersuchungsgebiet Mullewa befindet sich in West-Australien (WA) am östlichen Rand der Landwirtschaftsregion Nord (engl. *Northern Agricultural Region of WA*). Das Gebiet ist Teil des WA Weizengürtels (engl. *WA wheatbelt*) und liegt etwa 450 Kilometer nördlich von Perth und etwa 100 Kilometer östlich von Geraldton (vgl. Abb. 3.1). Die klimatischen Eigenschaften dieser geographischen Lage (s.u.) machen das Untersuchungsgebiet zu einem Extremstandort am Rand dieser Landwirtschaftsregion. Östlich davon ist Weizenanbau wegen der geringen Niederschlagsmengen nur noch sehr eingeschränkt möglich.

Westlich des Bauerndorfes Mullewa ($28^{\circ} 32' 15''$ S, $115^{\circ} 30' 25''$ E) wurden zwei Beobachtungstreifen für die pedologische Beprobung festgelegt: Streifen-WEST (Dimensionen: Nord-Süd: 41 Kilometer, West-Ost: 8,3 Kilometer) und Streifen-OST (Dimensionen: Nord-Süd: 30,8 Kilometer, West-Ost: 8,3 Kilometer). Lage und Dimensionen der Beobachtungstreifen orientierten sich am Aufnahmegebiet einer fernerkundlichen Befliegung (HyMap) vom Februar 2010 (vgl. Abb. 3.4).

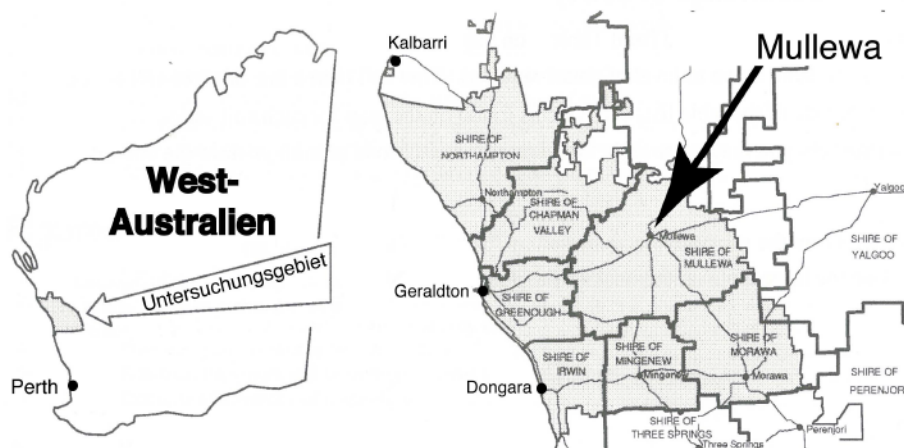


Abbildung 3.1: Lage des Untersuchungsgebietes Mullewa in West-Australien. Karte verändert aus Rogers (1996).

3.1 Klima

Das Untersuchungsgebiet Mullewa wird von einem semiariden Klima (an 6 - 9 Monaten/Jahr gilt: Niederschlag < potentielle Verdunstung) bestimmt. Milde, feuchte Winter und warme bis heiße, trockene Sommer prägen die Region. Nach der effektiven Klimaklassifikation von Köppen und Geiger wird das Gebiet den Mittelmeerklimaten (*Csa*) zugeordnet.

Abbildung 3.2 zeigt die Abnahme des durchschnittlichen jährlichen Niederschlags von der Küste landeinwärts als Isohyeten. Für das Untersuchungsgebiet Mullewa liegt die durchschnittliche jährliche Niederschlagsmenge zwischen 300 und 350 mm. Die vorherrschenden Winter-Niederschläge (April bis Oktober) sind für das Pflanzenwachstum besonders wirkungsvoll, da die Evaporation zu diesem Zeitpunkt niedrig ist. Hinzukommt, dass diese Niederschläge für gewöhnlich in geringer Intensität auftreten und von den sandigen Böden der Region in ergiebigem Maße aufgenommen werden können (hohe Infiltrationsrate) (Rogers, 1996).

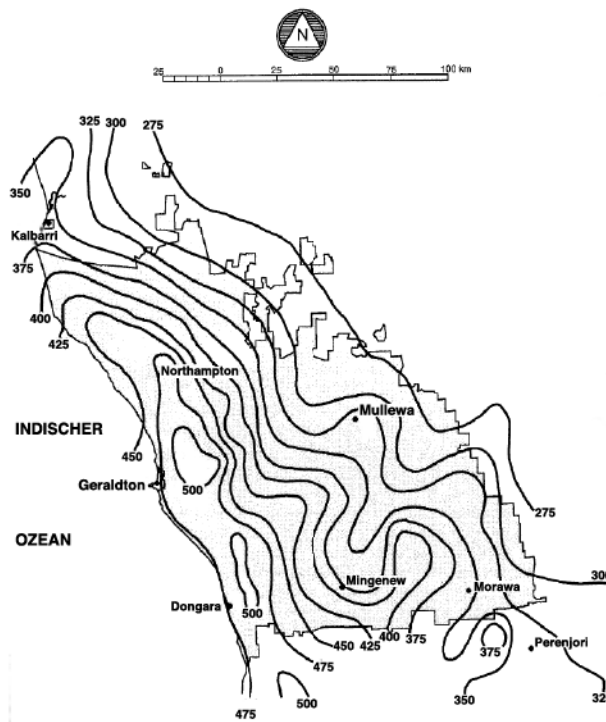


Abbildung 3.2: Isohyeten für die Region um das Untersuchungsgebiet Mullewa, aus Rogers (1996).

3.2 Geologie

Die Geologie des Untersuchungsgebietes wird maßgeblich von zwei Hauptstrukturen bestimmt, dem Perth Becken (engl. *Perth Basin*) im Westen und dem Yilgarn Kraton (engl. *Yilgarn Craton*) im Osten. Sie werden durch die Darling Verwerfung (engl. *Darling Fault*) voneinander getrennt.

Der Streifen-WEST befindet sich innerhalb des Perth Beckens, das hier von Sedimentgesteinen (*Tumblagooda* Sandstein) dominiert wird. Das Gleiche gilt für den westlichen Teil des Streifen-OST. Östlich der Darling Verwerfung wird der Streifen-OST vom Yilgarn Kraton bestimmt, das hier überwiegend von Graniten und Gneissen aus dem Archaikum geprägt wird, die teilweise von Doleritgängen und Quarzadern durchzogen werden.

3.3 Pedologie

Das Untersuchungsgebiet Mullewa wird weitgehend von sandigen Böden bestimmt, die charakteristisch für die ausgedehnten Sandebenen im Landesinneren Süd-West-Australiens sind. Sie sind das Ergebnis einer über Millionen von Jahren anhaltenden tiefreichenden Verwitterung der Landschaft (McKenzie et al., 2004). Ihre Entwicklung kann nach McKenzie et al. (2004) sowohl auf eine umfangreiche Verwitterung im Bodenprofil an Ort und Stelle zurückgeführt werden als auch durch eine Kombination aus Erosion und Ablagerung (kolluviale oder alluviale Sedimente) erklärt werden. Sandige Böden kommen auf den Sedimentgesteinen des Perth Beckens und auf den Graniten und Gneissen des Yilgarn Kraton vor.

Die texturalen Unterschiede sind insbesondere an den Bodenoberflächen meist klein. Der Gehalt an organischem Kohlenstoff ist nach McKenzie et al. (2004) *gering* (<1 %) bis *mäßig* (1–2 %). Dennoch tragen beide Parameter maßgeblich zum Erhalt der Oberflächenstabilität dieser Böden bei. Innerhalb des Sandgefüges der Bodenoberflächen ist sowohl der Tongehalt als auch der organische Kohlenstoff von entscheidender Bedeutung, um sich erosiven Kräften äolischer Natur zu widersetzen (Rogers, 1996).

Obwohl die Arbeit im Fokus einer fernerkundlichen Methodik zur Erfassung der Bodenoberflächen-Dynamik steht, stellt sich spätestens im Zuge eines *Langzeit-Monitoring* die Frage nach den Eigenschaften des gesamten Bodenvolumens. Wenn auch nicht davon ausgegangen werden kann, dass sich der Charakter des Bodentyps, zwangsläufig an der Oberfläche differenzierbar widerspiegelt, soll doch vor diesem Hintergrund eine vollständige pedologische Beschreibung folgen.

Die Beschreibung der Pedologie für das Untersuchungsgebiet basiert auf einer bodenkundlich-geomorphologischen Kartierung, die vom *Department of Agriculture and Food of Western Australia (DAFWA)* für die Region durchgeführt wurde (Rogers, 1996). Danach zeigen sich im Untersuchungsgebiet drei Landschaftssysteme, die bezüglich ihrer pedologischen Eigenschaften in Bodenserien unterteilt sind. Bodenserien sind als homogene Einheiten bezüglich ihrer landwirtschaftlichen Nutzung definiert. Um einen Vergleich auf internationaler Ebene zu ermöglichen, werden den Bodenserien außerdem Bodentypen zugewiesen.

Die Einteilung in Bodentypen basiert auf der Australischen Bodenklassifikation nach Isbell (1996). Danach treten im Untersuchungsgebiet im Wesentlichen zwei Bodentypen auf: *Tenosole* und *Kandosole*. Die südlich des Streifen-OST genommenen Zusatzproben werden den *Vertosolen* zugeordnet. In Tabelle 3.1 sind die pedologischen Eigenschaften dieser Bodentypen zusammengefasst. Ergänzend sind die entsprechenden Bodentypen der Bodenklassifikation des *United States Department of Agriculture (USDA Soil Taxonomy)* aufgeführt.

3.3.1 Pedologische Beschreibung auf Grundlage der DAFWA Landschaftssysteme und Bodenserien

Der Bereich des Perth Beckens wird von zwei Landschaftssystemen geprägt. Dominiert wird er von einer leicht reliefierten Sandebene (*Undulating Sandplain System*), die stellenweise von alluvialen Ablagerungen (*Alluvial Valley System*) unterbrochen wird (vgl. Abb. 3.4). Das Gebiet des Yilgarn Kratons wird von einem Bereich mit granitischem Ausgangsgestein bestimmt (*System*

Bodentyp (Australische Bodenklassifikation)	Eigenschaften	Bodentyp (USDA Bodenklassifikation)
TENOSOLS	Sie zeichnen sich durch ein sehr schwach ausgebildetes Bodenprofil aus (der A-Horizont ist davon ausgenommen). Der B-Horizont weist für gewöhnlich weniger als 15 % Tongehalt auf. Es handelt sich um sandige Böden mit guten Infiltrationseigenschaften.	Aridisole, Inceptisole, Entisole
KANDOSOLS	Sie zeigen keinen großen Unterschied im Tongehalt zwischen dem A- und dem B-Horizont. Die Textur des B-Horizont ist generell schwerer als die von sandigem Lehm (Tongehalt >15 %).	Alfisols, Ultisols, Aridisole
VERTOSOLS	Es handelt sich um tonhaltige Böden mit Quellpotential, die bei Wasserentzug Trockenrisse zeigen.	Vertosols

Tabelle 3.1: Bodentypen nach der Australischen Bodenklassifikation (Isbell, 1996) und die entsprechende Bodentypen der *USDA* Bodenklassifikation.

on *Granitic Rocks*). Die Ränder der Landschaftssysteme bzw. der Bodenserien stimmen nicht exakt mit der Trennungslinie der Darling Verwerfung überein.

Undulating Sandplain System

Auf dem Gebiet des *Undulating Sandplain System* treten drei Bodenserien auf, die *Eradu*-, die *Casuarina*- und die *Bootenal*-Serie. Sie werden in der *DAFWA*-Kartierung als gelbe, graue bzw. rote Sandböden bezeichnet (vgl. Abb. 3.4). Ihr Ausgangsmaterial ist durch eine stark sandige Textur unterschiedlicher Mächtigkeit gekennzeichnet. Die Sandschichten sind das Ergebnis stark ausgewaschener, kolluvialer Ablagerungen.

Die *Eradu*-Bodenserie umfasst mächtige gelbe Sandböden. Ihre Oberflächen zeigen gelbbraunen lehmigen Sand über braun-gelbem tonhaltigen Sand. Es handelt sich meist um sehr tiefreichende (typischerweise 2,5 bis 5,5 Meter, teilweise bis zu 15 Meter tief), neutrale bis schwach saure, silikatische Sande. Auf Dünenkämmen treten diese Böden deutlich grob texturierter in Erscheinung. Sie zeigen dort für gewöhnlich losen gelb-braunen Sand, der sich mit zunehmender Tiefe sukzessive zu braun-gelbem Sand entwickelt. In der Australischen Bodenklassifikation werden sie dem Bodentyp der *Regolithic Orthic Tenosols* zugeordnet.

Die Bodenserie *Casuarina* fasst mächtige fahl-graue Sandböden zusammen. Diese Böden kommen südlich des Streifen-WEST vor und zeigen grauen bis fahl-braunen Sand über sandigem Kies. Sie treten oft in Verbindung mit den gelben Sandböden auf und werden in der Australischen Bodenklassifikation als *Bleached-Orthic Tenosols* bezeichnet.

Die Bodenoberflächen beider Serien bestehen aus losem bis weichem Sandgefüge, was ihre Oberflächenstabilität stark beeinträchtigt. Die Anfälligkeit für Winderosion wird für die *Eradu*-Serie als *hoch*, für die *Casuarina*-Serie als *hoch bis sehr hoch* angegeben. In diesem Zusammenhang macht sich insbesondere der Verlust an organischer Substanz im Oberboden negativ bemerkbar. Abbildung 3.3 (A) und 3.3 (B) zeigen typische Bodenprofile der *Eradu*- bzw. der *Casuarina*-Serie.

Die *Bootenal*-Serie offenbart rote Sandböden, deren Ausgangsmaterial sich von den zwei anderen Systemen durch zusätzliche äolische Ablagerungen aus dem Quartär unterscheidet. Diese Böden zeichnen sich durch eine weiche bis druckfeste Oberfläche aus, die aus rot-braunem lehmig-

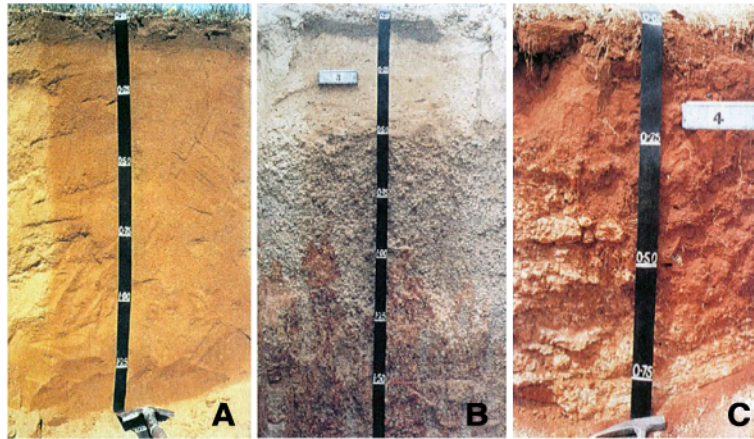


Abbildung 3.3: Typische Bodenprofile der Bodenserien: *Eradu*, *Casuarina*, und *Mindage*, aus Rogers (1996).

gen Sand besteht, der sukzessive in sandigen Tonlehm übergeht. Die Anfälligkeit für Winderosion wird als *mäßig bis hoch* angegeben, solange die Oberflächen nicht merklich unter dem Verlust an organischer Substanz gelitten hatten. Die *Bootenal*-Serie wird dem Bodentyp der *Mesotrophic Red Kandosols* zugeordnet.

Alluvial Valley System und System on Granitic Rocks

Das *Alluvial Valley System* und das *System on Granitic Rocks* zeigen beide im Bereich des Untersuchungsgebietes die Bodenserie *Mindage*. Das *Alluvial Valley System* wird von alluvialem und kolluvialem quartärem Ausgangsmaterial bestimmt. Dabei handelt es sich um verwittertes Material aus dem Gebiet des Yilgarn Kratons, welches in dünnen Sequenzen über rot-braunem Ortstein oder harten Kalkkrusten (engl. *calcrete*) abgelagert wurde. Das Gebiet des *System on Granitic Rocks*, das östlich der Darling Verwerfung liegt, wird in höheren Lagen von granitischem Ausgangsgestein geprägt. Niedrigere Standorte zeigen quartäre Kolluvial-Sedimente aus tonhaltigem und sandigem Material.

Die *Mindage*-Serie weist flachgründige rot-braune Lehme auf, die stellenweise verkrustet sind. Die Bodenoberfläche zeigt rot-braunen sandigen Lehm, der mit zunehmender Tiefe in sandigen Tonlehm übergeht und darunter oft rot-braunen Ortstein oder Granit (in höheren Lagen) erkennen lässt. Die lehmige Textur sowie die gebietsweise auftretenden Bodenkrusten führen bei diesen Böden zu einer erhöhten Oberflächenstabilität. Sie sind deshalb nur *gering* anfällig für Winderosion. In der Australischen Bodenklassifikation werden sie dem Bodentyp der *Duric Red Kandosols* zugeordnet. Abbildung 3.3C zeigt dazu ein typisches Bodenprofil.

3.4 Landwirtschaftliche Nutzung

Der Pflanzenanbau im Untersuchungsgebiet findet ohne zusätzliche künstliche Bewässerung statt. Die landwirtschaftliche Nutzung der Region wird grundsätzlich durch die Abnahme des jährlichen Niederschlags nach Osten und Norden begrenzt (vgl. Abb. 3.2). Abhängig von der Pflanzenart liegt diese Grenzlinie zwischen der 250– und der 300–Millimeter Isohyete. Die grob texturierten Böden, wie sie auf dem Gebiet der Sandebene vorkommen, wurden bis in die 1950er

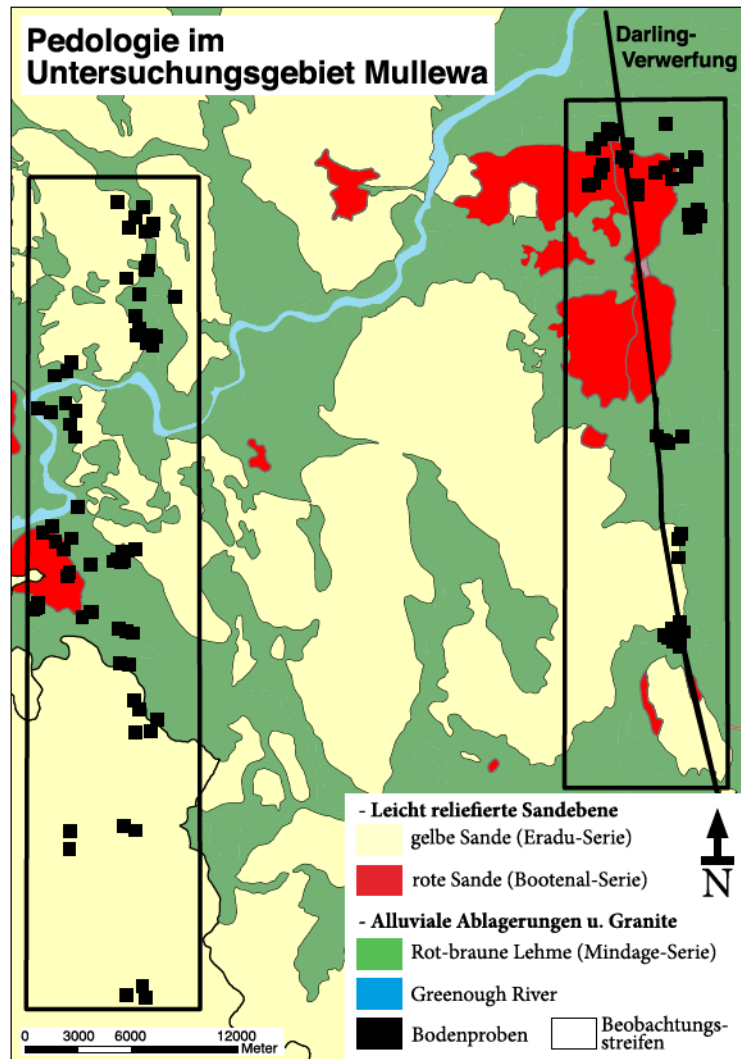


Abbildung 3.4: Pedologie im Untersuchungsgebiet Mullewa mit den Grenzen der Beobachtungsstreifen WEST und OST. Schwarz markiert sind die darin beprobten Standorte.

Jahren als „*nutzlos*“ bezeichnet. Erst mit der Verbreitung von Mineraldüngern und leistungsfähigeren Landmaschinen wurden auch diese Böden für den Anbau verschiedener Getreidearten erschlossen (Rogers, 1996).

Als Teil des Australischen Weizengürtels wird das Gebiet heute überwiegend für die landwirtschaftliche Produktion genutzt. Der Anbau von Weizen (hauptsächlich verschiedene Zwerg-Variationen des Winterweizens) dominiert die Region - es werden aber auch Gerste und Hafer angebaut. Auf einigen der Felder wird Fruchtwechsel praktiziert, wo sich in zwei- oder dreijähriger Fruchtfolge Getreide mit verschiedenen Leguminosen (Lupinen, Erbsen und Ackerbohnen) abwechselt. Teilweise werden Brachflächen als Weiden für Schafe genutzt, in selteneren Fällen auch für Kühe.

Aufgrund der vorherrschenden Anfälligkeit der Bodenoberflächen für Winderosion wird auf nahezu allen Feldern eine konservierende Bodenbearbeitung (engl. *conservation tillage*) angewendet. Um die Stabilität der Bodenoberflächen sowie die gespeicherte Bodenfeuchte zu erhalten, wird dabei der mechanische Eingriff auf ein Minimum reduziert. Die pfluglose Bodenbearbeitung verzichtet auf Bodenwendung und stößt die neue Saat direkt unter die Bodenoberfläche des Brachlandes (Direktsaatverfahren). Die Ernterückstände der Vorkultur dienen dabei zum einen als Mulch, weshalb das Verfahren auch als Mulchsaat bezeichnet wird, zum anderen schützen die abgeernteten Getreidestoppeln die Bodendecke vor Winderosion, indem sie die Oberflächenrauigkeit erhöhen. Während der Brachzeit gehören diese Getreidestoppeln zum typischen Erscheinungsbild der Ackerflächen im Untersuchungsgebiet von Mullewa.

Kapitel 4

Methodik

4.1 Boden-Spektroskopie

Die spektralen Signaturen der Bodenproben wurden mit vier unterschiedlichen Spektrometern im Labor gemessen. Für den thermalen Wellenlängenbereich wurden zwei passive Emissions-FTIR-Spektrometer (vgl. Kap. 4.1.1 und 4.1.2) und ein aktives Reflexions-FTIR-Spektrometer gebraucht (vgl. Kap. 4.1.3). Im solar-reflektiven Wellenlängenbereich wurde ein diffuses *VNIR-SWIR*-Reflexions-Spektrometer verwendet (vgl. Kap. 4.1.4). Die spektralen Messungen fanden an drei unterschiedlichen Standorten statt, was jeweils eine Neuschüttung der Bodenproben verlangte. Der Neuschüttung ging stets eine Homogenisierung der Probe voraus. Die *VNIR-SWIR*-Reflexions-Messungen sowie die Messungen mit einem der passiven Emissions-FTIR-Spektrometer (μ FTIR) konnten am selben Standort/Labor für eine möglichst identische Bodenoberfläche durchgeführt werden.

4.1.1 LWIR: Emissions FTIR-Spektroskopie (μ FTIR/CSIRO)

Für den Wellenlängenbereich des *LWIR* wurden die spektralen Signaturen der Bodenproben aus dem Streifen-West mithilfe der Emissions-FTIR-Spektroskopie (ε -FTIR-Spektroskopie) aufgezeichnet. Die ε -FTIR-Spektroskopie ist ein rein passives Messverfahren, bei dem die von der Probe selbst emittierte Strahldichte aufgezeichnet wird.

Die Messungen wurden mit einem *micro Fourier Transform Interferometer* (μ FTIR) (Model 102, Design & Prototype Instruments, www.dpinstruments.com) im Spektrallabor der *Commonwealth Scientific and Industrial Research Organisation* (CSIRO) in Perth (West-Australien) durchgeführt. Es handelt sich dabei um ein portables Spektrometer, das sowohl im Feld als auch im Labor betrieben werden kann. Die ε -FTIR-Spektroskopie wurde unmittelbar vor der *VNIR-SWIR*-Reflexions-Spektroskopie durchgeführt, um eine möglichst unveränderte Bodenoberfläche zwischen beiden Messungen zu garantieren.

Das μ FTIR nahm mit einer spektrale Auflösung (*FWHM*, engl. *full width half maximum*) von 6 cm^{-1} (@ $10\text{ }\mu\text{m}$, $\sim 60\text{ nm}$) und einem *Sampling Interval* von $\sim 2,87\text{ cm}^{-1}$ auf. Die Messungen wurden aus einer Höhe von 250 mm ausgeführt, was bei dem Gesichtsfeld (*FoV*, engl. *Field of View*) von $4,5^\circ$ einer geometrischen Messfläche von ungefähr 20 mm Durchmesser entsprach (*GFoV*, engl. *geometric FoV*). Das Instrument zeichnete die spektrale Strahldichte zwischen 2 und $16\text{ }\mu\text{m}$ mit einem dualen InSb/*MCT* (*Indium antimonide/Mercury Cadmium Telluride*) Detektor auf, der mit flüssigem Stickstoff (77 K (-196°C)) gekühlt wurde.

Die Bodenproben wurden für die ε -FTIR-Spektroskopie zuvor in einem Ofen auf eine Temperatur von 60°C erhitzt. Die relativ heißen Bodenproben garantierten durch den erhöhten Kontrast

zur Raumtemperatur ein besseres Signal-Rausch-Verhältnis (*SNR*, engl. *signal to noise ratio*). Die Integrationszeit pro Messung betrug 16 Scan-Wiederholungen (<5 Sekunden, Zeitaufwand pro Probe <1 Minute) - ein Kompromiss zwischen dem Abkühlungseffekt der Probenoberfläche während des Messvorgangs und der Qualität (*SNR*) der Spektren.

Die einzelnen Prozessierungsschritte der μ FTIR-Daten werden im Folgenden zusammengefasst. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Prozessierung auf den Wellenlängenbereich zwischen 7 und 14 μm (250 spektrale Bänder) reduziert (dieser Bereich wird ausschließlich durch den *MCT*-Detektor abgedeckt). Grund dafür war zum einen der fernerkundliche Fokus der Arbeit auf den spektralen Bereich der atmosphärischen Fenster, zum anderen wäre der eingeschränkte Temperaturbereich des Schwarzkörpers (3 – 95 °C), der zur Kalibrierung des μ FTIR verwendet wird, für die Wellenlängen des *MWIR* nicht ausreichend. Die Radiometrische Kalibrierung des Spektrometers sowie die Korrektur der Hintergrundstrahlung sind angelehnt an die Methoden von Hook und Kahle (1996) und Horton et al. (1998). Der Algorithmus zur Trennung von Temperatur und Emissivität basiert auf der *maximum spectral temperature* (MAXSPEC)-Methode (Korb und D’Aria, 2000; Salvaggio und Miller, 2001a). Für jede Probe ergaben sich vier Messungen (Radianzen des (1)warmen und (2)kalten Schwarzkörpers, der reflektierten (3)Hintergrundstrahlung sowie der (4)Bodenprobe) die im Folgenden beschrieben werden:

Radiometrische Kalibrierung des μ FTIR

In der radiometrischen Kalibrierung des μ FTIR wurde eine lineare Beziehung zwischen dem aufgezeichneten Signal (*DN*-Werte) und der am Sensor empfangenen spektralen Strahldichte ($L(\lambda)$, engl. *at-sensor radiance*) vorausgesetzt. Dabei gingen die instrument-spezifischen Faktoren, wie die Emission, die das Gerät selbst erzeugt, sowie die spektrale Empfindlichkeit des Systems als Offset (β) bzw. als Gain (α) in die Gleichung ein:

$$L(\lambda) = \alpha(\lambda) \cdot DN(\lambda) + \beta(\lambda) \quad (4.1)$$

Gain- und Offset-Werte wurden mittels zweier Schwarzkörper-Messungen bei bekannten Temperaturen bestimmt. Der Schwarzkörper (Model 41P, Design&Prototypes-Instruments) wurde dazu vor die Optik des μ FTIR montiert und über ein Peltier-Element zuerst auf eine Temperatur knapp unterhalb der Raumtemperatur gekühlt (T_{kalt} : 25 °C) und anschließend auf eine Temperatur erhitzt, die sich etwas über der der Probe befand (T_{warm} : 65 °C).

Die Gain-Werte wurden nach der folgenden Formel bestimmt:

$$\alpha(\lambda) = \frac{L_{SK}(T_w, \lambda) - L_{SK}(T_k, \lambda)}{DN_w(\lambda) - DN_k(\lambda)} \quad (4.2)$$

wobei $L_{SK}(T, \lambda)$ die über die Plancksche Formel berechneten spektralen Strahldichten des warmen (w) und kalten (k) Schwarzkörpers sind.

Der Offset wurde anschließend aus einer der beiden Schwarzkörper-Messungen nach folgender Formel berechnet:

$$\beta = L_{SK}(T, \lambda) - \alpha(\lambda) \cdot DN(\lambda) \quad (4.3)$$

Abschätzung der Hintergrundstrahlung

Da alle Objekte im Labor mit einer Temperatur größer als der absolute Nullpunkt eS emittieren, besteht die empfangene *at-sensor-radiance* nicht nur aus der von der Probe emittierten Strahlung. Im Laborraum emittierten zum Zeitpunkt der Messung zusätzlich die Wände, die Decke, sowie sämtliche Einrichtungsgegenstände Strahlung im Wellenlängenbereich des *LWIR*, die von der Probenoberfläche reflektiert wurde und dadurch teilweise auch ins Sensorfeld gelangte. Diese reflektierte Hintergrundstrahlung oder Gegenstrahlung (*DWR*, engl. *downwelling radiance*) muss von der emittierten Strahlung der Probe getrennt werden.

Die *DWR* wurde über die Messung einer diffusen (sandgestrahlten) Messingplatte bestimmt, die spektral flach ist und eine geringe Emissivität ($\varepsilon = 0.25$) aufweist. Dem Gesetz von Kirchhoff zufolge zeichnet sich die Messingplatte durch sehr gute Reflexionseigenschaften aus und ist daher für die Abschätzung der *DWR* geeignet. Die Temperatur der Messingplatte wurde über ein Kontaktthermometer bestimmt. Es wurde angenommen, dass sie näherungsweise der Raumtemperatur entspricht.

Ersatzweise kann die *DWR* auch unter Verwendung einer diffusen, goldbeschichteten Platte abgeschätzt werden (ebenso würde sich eine entsprechend diffuse Aluminiumplatte eignen). Gold zeichnet sich durch eine sehr geringe Emissivität ($\varepsilon \sim 0.03 - 0.06$) aus. Für Feldmessungen bei extrem trockener und klarer Atmosphäre, was sich in einer sehr kalte Hintergrundtemperatur (~ -40 °C) ausdrückt, liegen die mit der Goldplatte gemessenen Radianzen aufgrund des starken Temperaturkontrastes oft außerhalb des definierten Kalibrierungsbereichs der Schwarzkörper-Messungen (Salisbury, 1998). Unter diesen Bedingungen wird bei Feldmessungen daher die weniger stark reflektierende Messingplatte bevorzugt. Bei Labormessungen dagegen hat die Platte meist die gleiche Temperatur wie ihr Hintergrund. Daher spielt bei Labormessungen die absolute Emissivität/Reflektanz der verwendeten Platte keine große Rolle, vielmehr kommt es darauf an, die Hintergrundtemperatur so genau wie möglich abschätzen zu können.

Temperatur-Emissivitäts-Trennung (*TES*)

Die in der ε -FTIR-Spektroskopie passiv gemessene spektrale Strahldichte der Probe ist eine Funktion zweier Parameter, ihrer Emissivität und ihrer Temperatur. Um die Emissivität bestimmen zu können, muss daher die Temperatur der Bodenprobe bekannt oder abschätzbar sein. Dieser Fakt ist besonders bei Fernerkundungsdaten wesentlich, daher ist eine Trennung der zwei Parameter essenziell (*TES*, engl. *temperature-emissivity-separation*).

Um aus den gemessenen μ FTIR-Radianzen die Werte der Emissivität zu berechnen, wurde ein *TES*-Algorithmus verwendet, der dafür die Messung der Probe sowie die der Messingplatte nutzte. Der *TES*-Algorithmus basiert auf der Annahme, dass sich die gemessenen Radianzen der Probe (L_S) und der Messingplatte (L_{MP}) aus den Komponenten nach Gleichung 4.4 und 4.5 zusammensetzen (Kahle und Alley, 1992; Hook et al., 1999; Salvaggio und Miller, 2001b).

$$L_S = \varepsilon_S L_{SK}(T_S) \tau + (1 - \varepsilon_S) L_{DW} \tau \quad (4.4)$$

$$L_{MP} = \varepsilon_{MP} L_{SK}(T_{MP}) \tau + (1 - \varepsilon_{MP}) L_{DW} \tau \quad (4.5)$$

wobei ε_S und ε_{MP} die Emissivitäten, T_S und T_{MP} die Oberflächentemperaturen der Probe bzw. der Messingplatte sind. L_{DW} ist die bereits bekannte *DWR* und τ beschreibt die Transmission der Atmosphäre zwischen der Probe und dem Sensor.

Da der Abstand zwischen Sensor und Probe ausreichend klein war, konnte der atmosphärische Einfluss vernachlässigt werden, $\tau = 1$. Die Emissivität der Messingplatte war bekannt ($\varepsilon_{MP} = 0.25$). Unter diesen Voraussetzungen konnte die *DWR* (L_{DW}) aus Gleichung 4.5 berechnet werden.

Um die Emissivität der Bodenprobe nach Gleichung 4.4 zu berechnen, musste zuvor deren Temperatur abgeschätzt werden. Dazu wurde eine weitere Annahme getroffen, die den Kern der *TES* bildet und als *maximum spectral temperature method* (MAXSPEC) bezeichnet wird. Für eine bestimmte Wellenlänge sollte die maximale Emissivität (ε_{max}) der Probe bekannt sein. Der *TES*-Algorithmus suchte dazu innerhalb eines definierten Bereichs (7,5 und 13 μm) die Wellenlänge, bei der die höchste Strahlungstemperatur (engl. *spectral* oder *brightness temperature*) auftrat und setzte dort die Emissivität auf $\varepsilon_{max} = 1.0$. Für die Bodenproben aus Mullewa, die von Silikaten dominiert werden, traf diese Aussage meistens in den Bereichen ihrer *CFF* zu, bei $\sim 7,5 \mu\text{m}$ und bei $\sim 12,3 \mu\text{m}$ (vgl. Kap. 2.3.2), wo die Emissivitäten nahe 1.0 lagen. Für diese Wellenlänge wurde anschließend die Temperatur der Probe (T_S) nach Gleichung 4.6 berechnet.

$$T_S = \max(\lambda) \left\{ B^{-1}([L_S - L_{DW}]/\varepsilon_{max} + L_{DW}) \right\} \quad (4.6)$$

wobei $B^{-1}(L)$ die inverse Planck Funktion darstellt, welche die Temperatur als Funktion der spektralen Strahldichte liefert.

Herleitung der wahren Emissivität

Ohne Berücksichtigung der *DWR* kann bei bekannter Temperatur der Bodenprobe deren Emissivität schlicht nach Gleichung 2.7 berechnet werden, die dann im Allgemeinen als „scheinbare“ Emissivität (engl. *apparent emissivity*) bezeichnet wird. Für die μFTIR -Daten wurde die „wahre“ Emissivität (engl. *true emissivity*) berechnet. Dazu wurde Gleichung 4.4 nach ε_S aufgelöst und die spektrale Strahldichte der Probe um die der Messingplatte (*DWR*) korrigiert. Die in der *TES* abgeschätzte Probentemperatur (T_S) ging in die Berechnung ein.

$$\varepsilon_S = \frac{L_S - L_{DW}}{L_{SK}(T_S) - L_{DW}} \quad (4.7)$$

Die beschriebenen Prozessierungsschritte wurden mit einer IDL-Software umgesetzt, die von Andy Green am CSIRO entwickelt wurde. Die Software wurde ursprünglich für die Prozessierung von *Outdoor*-Daten entwickelt. Sie ignoriert deshalb den potentiellen Vorteil bei der Prozessierung von *Indoor*-Daten, wofür eigentlich keinerlei Informationen über die Emissivität/Reflektanz der Metallplatte bekannt sein müsste. So lange die Platte die gleiche Temperatur hat wie das Labor, sieht sie aus wie ein Schwarzstrahler.

4.1.2 LWIR: Emissions FTIR-Spektroskopie (MIDAC/ITC)

Während der Messkampagne am CSIRO in Perth (vgl. Kap. 4.1.1) konnte nur ein Teil der Bodenproben mit dem μ FTIR spektral erfasst werden. Deshalb wurden zu einem späteren Zeitpunkt noch einmal mittels ε -FTIR-Spektroskopie alle Bodenproben am ITC (*Faculty of Geo-Information Science and Earth Observation of the University of Twente*) in Enschede eingemessen. Dazu wurde ein MIDAC *Illuminator* (Model M4401) der Firma *Midac Corporation* (www.midac.com) verwendet – ein portables, passives ε -FTIR Spektrometer vergleichbar mit dem μ FTIR. Aufgrund der Ähnlichkeit beider Systeme und der verwendeten Methodik zur Prozessierung der MIDAC-Daten soll im Folgenden nur auf die Unterschiede eingegangen werden.

- Das MIDAC Spektrometer besitzt ausschließlich einen *MCT*-Detektor, der im Wellenlängenbereich zwischen 2,5 und 20 μm spektral aktiv ist. Das *FWHM* betrug für die Messungen 4 cm^{-1} und das *Sampling Interval* $\sim 3,86 \text{ cm}^{-1}$. Für diese Studie wurde der Bereich auf 7 – 14 μm (185 spektrale Bänder) reduziert.
- Der verwendete Standard zur Bestimmung der *DWR* war mit diffus-reflektierendem Gold (Infragold®) beschichtet. (Die absolute Emissivität/Reflektanz des Standards spielt bei Labormessungen keine große Rolle, vgl. Kap. 4.1.1.)
- Die Bodenproben wurden in einem Ofen auf 70 °C erhitzt und wurden mit einer im Vergleich zum μ FTIR relativ langen Integrationszeit von 64 Scans (~ 15 Sekunden, Zeitaufwand pro Probe < 1 Minute) gemessen (jede der 64 Messungen wurde separat aufgezeichnet).
- Die *fore optic* war eine Maßanfertigung, die eigens für das ITC entwickelt wurde und einen *FoV* von 18 mrad hatte. Der Abstand zur Probe bzw. zum Standard betrug 10 cm, was einen *G FoV* von ~ 55 mm ergab.
- Zwei separate Schwarzkörper waren direkt an die *fore optic* des MIDAC montiert. Der warme Schwarzkörper, der über dem „*Nordpol*“ der *fore optic* befestigt war, wurde auf eine Temperatur von 70 °C erhitzt. Der kalte Schwarzkörper befand sich senkrecht dazu („*Äquator*“-Position) und war bei der Messung 20 °C kalt. Die Position des „*Südpols*“ diente der Messung der Probe und der Metallplatte (*downlooking mode*). Mithilfe eines rotierbaren Spiegels konnte zwischen den drei Positionen gewechselt werden.

Der zur Trennung von Temperatur und Emissivität verwendete *TES*-Algorithmus basierte für die MIDAC-Daten auf einer *Blackbody-Fit* Methode (Kahle und Alley, 1992; Salvaggio und Miller, 2001a). Der Algorithmus suchte dabei eine möglichst passende Schwarzkörper-Radianz-Kurve, die nach Gleichung 4.7 ein ε -Spektrum lieferte, das innerhalb eines definierten Wellenlängenbereichs (7,0 – 7,5 μm) einem definierten ε -Maximum am nächsten kam. Als Startwerte für diesen iterativen Prozess dienten die Temperaturen der beiden Schwarzkörper-Messungen (T_{kalt} und T_{warm}), welche die der Probe beidseitig umschlossen.

4.1.3 LWIR-MWIR-SWIR: DHR-FTIR-Spektroskopie (GFZ)

Direktional-hemisphärische Reflexions-Messungen (DHR) wurden im Spektrallabor des Helmholtz-Zentrums Potsdam - Deutsches GeoForschungsZentrum (GFZ) - unter Verwendung eines FTIR-Spektrometers (Spectrum GX) der Firma Perkin Elmer durchgeführt. Dabei handelt

es sich im Gegensatz zur ε -FTIR-Spektroskopie (vgl. Kap. 4.1.1) um ein aktives System, das über eine interne Strahlungsquelle (luftgekühlte Drahtspule) verfügt und die spektrale Signatur als Reflektanz aufzeichnet (das Instrument bietet außerdem die Möglichkeit der Transmissions-Messung mittels des DTGS (Deuterated TriGlycine Sulfat) Standard-Detektors). Das Gesetz von Kirchhoff (vgl. Kap. 2.2.1) erlaubt dabei die Umwandlung der DHR-Spektren in directionale Emissivitäts-Spektren und ermöglicht damit den Vergleich mit den Messungen aus der ε -FTIR-Spektroskopie.

Messung mit Integrationskugel

Die spektralen Messungen erfolgten mit einer aus diffus-reflektierendem Gold beschichteten Integrationskugel (Ulbrichtkugel) der Firma *Labsphere*. Die Integrationskugel hatte einen Durchmesser von 10,2 cm und verfügt am Kugelboden über eine Probenraumöffnung mit einem Durchmesser von 2,5 cm. Daraus ergab sich ein Messfleck (*GForV*) von circa 1,5 cm. Die Bodenprobe wurde von unten an der Probenraumöffnung angebracht und erlaubt dadurch, wie auch bei der ε -FTIR-Spektroskopie, Messungen von den Oberflächen der Bodenproben (*downlooking mode*).

Bei der Messung mit Integrationskugel wird ein kollimiertes Strahlenbündel durch eine Öffnung an der Kugeldecke auf die Bodenprobe gelenkt (10° *off-nadir*) und die reflektierte Energie wird gemessen. Die Kugel erfasst die Gesamtheit der diffusen Streuteile der von der Bodenoberfläche unter allen Winkeln reflektierten Strahlung. Die Energie wird von einem *MCT*-Detektor gemessen, der sich seitlich an der Kugel befindet (senkrecht zur Hauptebene). Der Detektor wird durch eine Blende vor der spiegelnden Reflexion der Probe und der direkt gegenüberliegenden Kugelwand geschützt. Der *MCT*-Detektor wurde über ein mit flüssigem Stickstoff gefülltem Dewargefäß gekühlt.

Unter Berücksichtigung des erhöhten Rauscheinflusses an den Rändern der Detektor-Empfindlichkeit wurde die Messung auf den Wellenlängenbereich zwischen $1,6 - 16 \mu\text{m}$ ($6250 - 625 \text{ cm}^{-1}$) begrenzt. Die Messungen wurden mit einer spektralen Auflösung (*FWHM*) von 4 Wellenzahlen (cm^{-1}) ausgeführt, was in Wellenlängen (*nm*) einer spektralen Auflösung von circa 1 nm bei $1,6 \mu\text{m}$ und circa 100 nm bei $16 \mu\text{m}$ entspricht (@ $10 \mu\text{m}$, $\sim 40 \text{ nm}$). Das *Sampling Interval* betrug $\sim 1 \text{ cm}^{-1}$. Für den spektralen Bereich zwischen 7 und $14 \mu\text{m}$, der sich mit dem der zwei anderen Spektrometer (μ FTIR und MIDAC) überschneidet, ergaben sich 715 spektrale Bänder.

In der FTIR-Spektroskopie wird hauptsächlich die Einheit Wellenzahl (*wz*) verwendet, da sie direkt proportional zur Energie der Strahlung ist. Die Umrechnung in Wellenlängen (μm) erfolgt nach folgender Beziehung:

$$[\mu\text{m}] = 10000 / \text{wz}[\text{cm}^{-1}] \quad (4.8)$$

Der Unterschied zeigt sich auch in der Darstellung der Spektren. Wird gegen die Wellenlänge aufgetragen, zeigt sich der langwellige Bereich im Vergleich aufgespreizt.

Integrationszeit und Kalibrierung

Um dem Energieverlust durch die multiplen Streuvorgänge an der Kugel-Innenoberfläche Rechnung zu tragen, wurden eine Integrationszeit von 512 Scans gewählt. Die Messung wurde viermal wiederholt, ohne dabei die Probe zu bewegen.

Vor jeder Messung einer Bodenprobe wurde eine Referenz-Messung der Hintergrundstrahlung durchgeführt, wobei die Probenraumöffnung mit einer Referenzscheibe - beschichtet analog zur Kugel-Innenoberfläche - verschlossen wurde. Der Strahlengang wurde für die Referenz-Messungen jeweils von der Probenraumöffnung (bzw. Referenzscheibe) weg an die Kugelwand gelenkt. Aus den beiden Messungen wurde ein Ratio gebildet, um relative Reflektanzwerte (%) der Bodenoberflächen zu erhalten. Die verwendete Methode wird auch als *substitution method* bezeichnet. Im Vergleich zur *comparative method* integriert sie das spektrale Signal der Probe nicht in die Referenz-Messung (Hecker et al., 2011).

Aufgrund des besseren *SNR* bei der Referenzmessung wurde dabei die Integrationszeit auf 256 Scans beschränkt. Die Messung einer Bodenprobe (2048 + 256 Scans) nahm bei dieser Methode etwa 40 Minuten in Anspruch und war damit deutlich höher als bei der ε -FTIR-Spektroskopie.

4.1.4 VNIR-SWIR: Diffuse Reflexions-Spektroskopie

Die Bodenspektren wurden für den *VNIR-SWIR* mit einem *Analytical Spectral Devices (ASD) Inc FieldSpec* (www.asdi.com) Spektrometer aufgenommen. Das ASD-Spektrometer wurde mittels einer Kontaktoptik (engl. *contact probe*) bedient, die über eine integrierte Strahlungsquelle verfügte (*GfOV* von ~ 10 mm). Die spektrale Auflösung des ASD betrug 3 – 4 nm zwischen 0,35 und 1,1 μm (spektrales *Sampling*: 1,4 nm) und 10 - 12 nm zwischen 1,0 und 2,5 μm (spektrales *Sampling*: 2 nm). Aus Gründen der Darstellung wurde über das gesamte Spektrum ein *Resampling* auf 1 nm durchgeführt, woraus sich insgesamt 2151 spektrale Bänder ergaben.

Die vom ASD-Spektrometer gemessenen spektralen Strahldichten wurden mittels einer Dunkelstrom-Messung, sowie der Messung eines Weißstandards (Spectralon[®]) auf Reflektanzwerte kalibriert. Die spektralen Reflektanz-Messungen wurden unmittelbar nach der ε -FTIR-Spektroskopie durchgeführt, um eine möglichst unveränderte Bodenoberfläche zu garantieren.

4.2 Spektrales *Resampling* auf Fernerkundungs-Sensorik: TASI (32), HypSIRI (6), ASTER (5) und HyMap (116)

Um die im Labor erhobenen Bodenspektren unter dem fernerkundlichen Fokus der Arbeit bewerten zu können, wurden die Daten den spektralen Spezifikationen von operationell zur Verfügung stehenden hyperspektralen und multispektralen Fernerkundungs-Sensoren angepasst (spektrales *Resampling*).

Für den solar-reflektiven Bereich wurde dafür der flugzeuggetragene Sensor HyMap (2010 HyVISTA Co.), für den Bereich des thermalen Infrarots der flugzeuggetragene Sensor TASI-600 (2009 ITRES Research Limited) ausgewählt – dabei handelt es sich bei beiden um hyperspektrale Fernerkundungs-Systeme. Außerdem wurden die spektralen Charakteristika zweier multispektraler Satelliten-Sensoren für das thermale Infrarot getestet: das thermale Modul von ASTER

(*Advanced Spaceborne Thermal Emission and Reflection Radiometer*) und das thermale Modul eines noch nicht realisierten aber vom *JPL* (*Jet Propulsion Laboratory*) und der *NASA* (*National Aeronautics and Space Administration*) geplanten Satelliten *HypIRI* (*Hyperspectral Infrared Imager*) (Hulley und Hook, 2011).

Der Sensor HyMap besitzt 125 spektrale Bänder im Bereich von 0,45 bis 2,48 μm . Neun dieser Bänder, die sich im potentiellen Einflussbereich der beiden Wasser-Absorptionsbanden bei $\sim 1,4 \mu\text{m}$ (4) bei $\sim 1,8 \mu\text{m}$ (5) befanden, wurden entfernt (116 Bänder). Die spektrale Auflösung (*FWHM*) von HyMap liegt zwischen 15 und 20 nm. TASI-600 deckt den Bereich von 8 bis 11,4 μm ab. Darin verfügt er über 32 spektrale Bänder mit einer *FWHM* von 125 nm.

Das thermale Modul von ASTER besitzt im *LWIR* zwischen 8,3 und 11,3 μm fünf spektrale Bänder (B10 bis B14). Das *FWHM* der ersten drei Bänder (B10 bis B12) beträgt 350 nm, die der Bänder B13 und B14 jeweils 700 nm. Die ASTER-Bänder haben eine geometrische Auflösung von 90 mal 90 Metern. HypIRI's thermale Modul verfügt über insgesamt acht Bänder (B1 bis B8), wobei sich Band 1 im *MWIR* bei $\sim 4 \mu\text{m}$ befindet und für die Detektion von heißen Objekten vorgesehen ist (z.B. Waldbrände oder Lavaströme). Band 2 befindet sich bei $\sim 7,5 \mu\text{m}$ und soll bei der atmosphärischen Korrektur helfen. Die restlichen sechs Bänder (B3 bis B8) befinden sich im *LWIR* zwischen 8 und 12,14 μm und wurden für das spektrale *Resampling* verwendet. Das *FWHM* der Bänder B3 bis B5 beträgt zwischen 340 und 360 nm, die der Bänder B6 bis B8 zwischen 520 und 540 nm. Die geometrische Auflösung der acht HypIRI Bänder liegt nach derzeitiger Planung bei 60 mal 60 Metern (Hulley und Hook, 2011). Die fünf HypIRI-Bänder B3 bis B7 sind den fünf ASTER-Bändern spektral sehr ähnlich. Abbildung 4.1 zeigt die spektralen Sensor-Responses (*SRF*, engl. *spectral response function*), wie sie auf Basis der spektralen Spezifikationen für beide Sensoren definiert wurden.

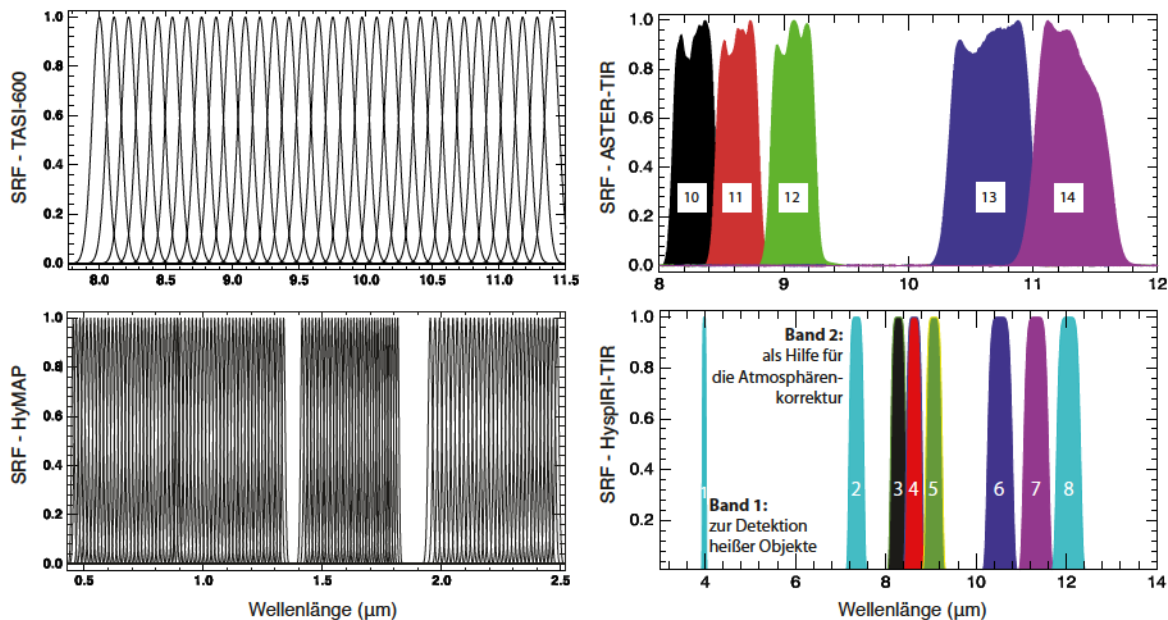


Abbildung 4.1: Spektrale Sensor-Responses (*SRF*) der Sensoren TASI-600 (32), HyMAP (125), ASTER-TIR (5) und HypIRI-TIR (8) wie sie auf Basis ihrer spektralen Spezifikationen definiert wurden, in Klammern stehen die Anzahl der Bänder.

Sowohl HyMAP als auch TASI-600 stehen als hyperspektrale Fernerkundungs-Sensoren operationell zur Verfügung. Ihre Spezifikationen entsprechen den spektralen Charakteristika der Bodenparameter (vgl. Kap. 2.4), die für die Fragestellung der Arbeit relevant sind. Der Sensor

HyMAP wurde in den letzten 10 bis 15 Jahren in großem Umfang für die hyperspektrale Fernerkundung im solar-reflektiven Wellenlängenbereich eingesetzt. TASI-600 ist einer der wenigen hyperspektralen *LWIR*-Sensoren, die momentan operationell einsetzbar sind. Ein vergleichbarer Sensor, SEBASS (engl. *spatially enhanced broadband array spectrograph system*), ist nur sehr schwer zugänglich. Er deckt einen etwas breiteren Wellenlängenbereich im *LWIR* ab (7,6 bis 13,5 μm). Neben den 128 Bändern im *LWIR* besitzt SEBASS außerdem 128 Bänder im *MWIR* zwischen 2,5 und 5,3 μm . Die Entscheidung zugunsten des TASI-600 für diese Arbeit gründet zum einen auf der besseren Verfügbarkeit dieses Sensors, zum anderen soll damit gezeigt werden, dass die reduzierte spektrale Abdeckung und Auflösung der Fragestellung der Arbeit genügen.

Die ε -Spektren wurden mithilfe des Kirchhoffschen Gesetzes (vgl. Kap. 2.2.1) in Reflektanz-Spektren umgewandelt. Die *VNIR-SWIR*- und die *LWIR*-Spektren wurden von Reflektanz- in Absorptionswerte transformiert, um in der folgenden statistischen Quantifizierung dem Lambert-Beerschen Gesetz (vgl. Kap. 2.2.2) zu entsprechen.

4.3 Quantifizierung der pedologischen Parameter

Zur quantitativen Bestimmung der pedologischen Parameter auf Grundlage der gemessenen spektralen Signaturen wurden multivariate Regressionsanalysen verwendet. Da sich pedologisch relevante spektrale Informationen meist breit über den hochdimensionalen Datenraum streuen, wurde dieser empirische Ansatz denen in der Geologie sonst geläufigeren *sF*-basierten Modellierungs-Ansätzen vorgezogen (vgl. Kap. 1.1).

4.3.1 Multivariate Regressionsanalyse

Die Quantifizierung der Bodenparameter wurde über eine *Partial Least Squares Regression* (*PLSR*) realisiert. Sie ist unter den multivariaten Regressionsmethoden vorzugsweise für spektroskopische Anwendungen geeignet. Hochdimensionale Datensätze, wie sie in der Spektroskopie erzeugt werden, zeigen in der kontinuierlichen Abfolge der spektralen Bänder in der Regel sich fortlaufend überlappende Response-Funktionen (*SRF*, engl. *spectral response function*). Dies führt zu stark korrelierten Bändern (Multikollinearität), die zudem noch Rauschen beinhalten. Bedingungen, unter denen traditionelle multiple lineare Regressionen (*MLR*) im Allgemeinen scheitern (Esbensen, 2006). Zudem verlangt die *MLR* nach einer Probenanzahl, die größer ist als die Anzahl der zu regressierenden Variablen (spektrale Bänder) (Kessler, 2006), was vor allem in der Laborspektroskopie - mit meist mehreren Hundert Bändern - nur schwer zu verwirklichen wäre. Die *PLSR* dagegen ist auf diese Bedingungen zugeschnitten. Sie ist in der Lage die Redundanz im Datensatz zu ignorieren und gleichzeitig genau diejenigen spektralen Informationen hervorzuheben, welche für die zu untersuchende Variable signifikant sind.

Die *PLSR* basiert grundsätzlich auf zwei Matrizen (bzw. einer Matrix und einem Vektor): den spektralen Bändern (viele X-Variablen oder unabhängige Variablen) sowie dem jeweiligen pedologischen Parameter (eine y-Variable, abhängige Variable oder Response-Variable). Eine *PLSR* kann auch mehrere Y-Variablen in einem Modell berücksichtigen (*PLSR-2*). Analog zur Hauptkomponentenanalyse (*PCA*, engl. *principle component analysis*), wird auch bei der *PLSR* der hochdimensionale Datenraum auf einige wenige latente Variablen (Faktoren oder Hauptkomponenten) reduziert, die nach den Anteilen ihrer erklärenden Varianzen aufsteigend sortiert sind. Anders als in der *PCA* jedoch, wo die Varianz in *X* maximiert wird, steht bei der *PLSR* die Ma-

ximierung der Kovarianz zwischen X und y im Mittelpunkt (Kessler, 2006; Hecker et al., 2012). Der Ablauf der *PLSR* gliederte sich in zwei Phasen: Kalibrierung und Validierung. Beide Phasen werden im Folgenden kurz vorgestellt. Die Beschreibung basiert auf den Werken von Martens und Naes (1992), Esbensen (2006) und Kessler (2006), die einen sehr detaillierten Einblick in die *PLSR* geben.

PLSR-Kalibrierung

In der *PLSR*-Kalibrierung wurde unter Verwendung des NIPALS-Algorithmus (Martens und Naes, 1992) zuerst ein Regressionsmodell erstellt. Dabei wurde ein funktionaler Zusammenhang zwischen X und y modelliert. Die daraus resultierende Regressionsgleichung beschreibt diesen Zusammenhang und dient der Vorhersage unbekannter y -Variablen aus den gemessenen spektralen Signaturen neuer Bodenproben. Für jeden Faktor wurde ein eigenes Modell erstellt, wobei jeweils das Bestimmtheitsmaß (R^2) und der mittlere Kalibrierfehler (*RMSEC*, engl. *Root Mean Square Error of Calibration*) berechnet wurden (vgl. Formel 4.9 bzw. 4.10). Der R^2 -Wert stellt das Verhältnis aus der erklärten Varianz in y (Vorhersage durch das Regressions-Modell) zur Gesamtvarianz von y (gemessene Referenzwerte) unter Verwendung der X -Variablen (hier Spektren) dar. Bei $R^2 = 1.0$ sind alle Residuen null und damit sind die vorhergesagten Werte gleich den Referenzwerten (Esbensen, 2006; Kessler, 2006). Während der *RMSEC* mit zunehmender Faktorenzahl abnimmt, steigt der R^2 -Wert an. Die Anzahl der verwendeten Faktoren richtete sich nach den Ergebnissen aus der Kreuz-Validierung (siehe *PLSR*-Validierung). Der *RMSE*-Wert bezieht sich auf die Einheit der Variablen. Um zwischen unterschiedlichen Variablen vergleichen zu können, wird gegebenenfalls eine dimensionslose Form des *RMSE* gewählt, der normalisierte *RMSE* (*NRMSE*, vgl. Formel 4.11).

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (4.9)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n}} \quad (4.10)$$

$$NRMSE = \frac{RMSE}{y_{max} - y_{min}} \quad (4.11)$$

wobei y der Referenzwert, \hat{y} der vorhergesagte Wert, \bar{y} der Mittelwert und n die Probenanzahl ist.

In der *PLSR*-Kalibrierung werden die *P-loadings* und die *W-loadings* berechnet. Die *P-loadings* (oder spektrale *loadings*) entsprechen dabei den *loadings* aus der *PCA* und beschreiben den Zusammenhang zwischen den X -Variablen und deren *T-Scores* (Matrix mit Faktorenwerten pro Objekt und Faktor). Die *W-loadings* (w) - auch Gewichts-*loadings* oder Wichtungsvektoren genannt - drücken den Zusammenhang zwischen den X -Variablen und der Zielgröße y aus und sind orthogonal zueinander (Kessler, 2006).

$$w_a = cX_a^T y_a \quad (4.12)$$

wobei a die Faktorenzahl und c ein Skalierungsfaktor ist, der w auf 1 normiert.

Mithilfe der Regressionsgleichung werden die y -Werte aus neu gemessenen X -Werten vorhergesagt. Dazu wurde die Regressionskonstante (b_0) sowie die Regressionskoeffizienten (b) berechnet (Kessler, 2006).

$$y = 1b_0 + Xb \quad (4.13)$$

$$b_0 = \bar{y} - \bar{x}^T b \quad (4.14)$$

$$b = W(P^T W)^{-1} q \quad (4.15)$$

wobei W die gewichteten *loadings*, P die spektralen *loadings*, q die chemischen *loadings* und t die Faktorenwerte sind.

PLSR-Validierung

Um die Güte des Regressionsmodells hinsichtlich seiner zukünftigen Vorhersagbarkeit von unbekannten Daten zu überprüfen, wurde einer *PLSR*-Validierung durchgeführt. Dazu wurden Daten verwendet, die nicht an der Kalibrierung des Modells beteiligt waren. Man unterscheidet die interne Validierung von der externen Validierung. Umfang und Charakter der Datensätze favorisierten für diese Arbeit die interne Validierung.

- Interne Validierung

Für Datensätze mit geringer Probenanzahl sowie für Datensätze mit stark asymmetrischer Verteilung wurde eine interne Validierung bevorzugt, da sich in beiden Fällen kein repräsentativer separater Test-Datensatz für eine externe Validierung abtrennen ließ. Die interne Validierung wurde durch eine vollständige Kreuz-Validierung (engl. *full cross validation*) umgesetzt, ein iterativer Validierungsprozess, bei dem jeweils auf eine Probe bei der Modellbildung verzichtet wird. Anschließend wird der y -Wert der ausgeschlossenen Probe mit der berechneten Regressionsgleichung vorhergesagt und mit dem y -Referenzwert verglichen. Sowohl das Bestimmtheitsmaß als auch der mittlere Vorhersagefehler oder Validierungsfehler ($RMSE(X-VAL)$, engl. *Root Mean Square Error of Cross Validation*) wurden dabei berechnet. Die nach der Regressionsgleichung berechneten y -Werte wurden den tatsächlich gemessenen Werten (Referenzwerte) grafisch gegenübergestellt (vgl. Abb. 4.2).

Die vollständige Kreuz-Validierung diene darüber hinaus der Bestimmung der optimalen Anzahl der Faktoren des *PLSR*-Modells, um ein Über- oder Unterfitten zu vermeiden. Der Umstand, dass in der Regel jeder weitere Faktor den $RMSE(X-VAL)$ schmälert und die R^2 -Werte erhöht, könnte zur Wahl zusätzlicher Faktoren verleiten. Dadurch steigt aber auch das Risiko eines Überfittens, was das Modell weniger robust für eine Vorhersage machen

würde. Ein möglichst robustes Modell wurde dadurch garantiert, dass eine Faktorenzahl gewählt wurde, die einerseits den Datenraum ausreichend beschrieb, andererseits aber nicht durch unnötig zusätzliche Faktoren das Rauschen in den Spektren mit modelliert (Überfitten). Zur Beurteilung wurden dazu einerseits der $RMSE(X-VAL)$ berücksichtigt (vgl. Abb. 4.2): Sobald dieser mit einem zusätzlichen Faktor nicht mehr merklich kleiner wurden, ist darauf verzichtet worden. Außerdem wurden die W -loadings zur Beurteilung herangezogen (s.u. Kap. 4.3.2).

Ein Überfitten (Überanpassung) zeichnet sich auch durch eine gute Vorhersage in der Kalibrierung und gleichzeitig schlechter Vorhersage neuerer Daten in der Validierung aus. Die Robustheit der Modelle wurde daher auch anhand der Konformität der Regressionslinien sowie den Entwicklungen der y -Varianzen aus Kalibrierung und Validierung bewertet. Waren die Unterschiede zwischen Kalibrierung und Validierung gering wurden die Modelle als robust eingestuft.

- Externe Validierung

Es wurde keine externe Validierung für diese Arbeit durchgeführt. Zur Vollständigkeit: Für eine externe Validierung wird ein separater Test-Datensatz abgetrennt. Da auch für einen solchen Test-Datensatz die y -Referenzen vorhanden sind, kann für die Modelle auch hier der Vorhersagefehler berechnet werden, der in der externen Validierung als $RMSEP$ (engl. *Root Mean Square Error of Prediction*) bezeichnet wird.

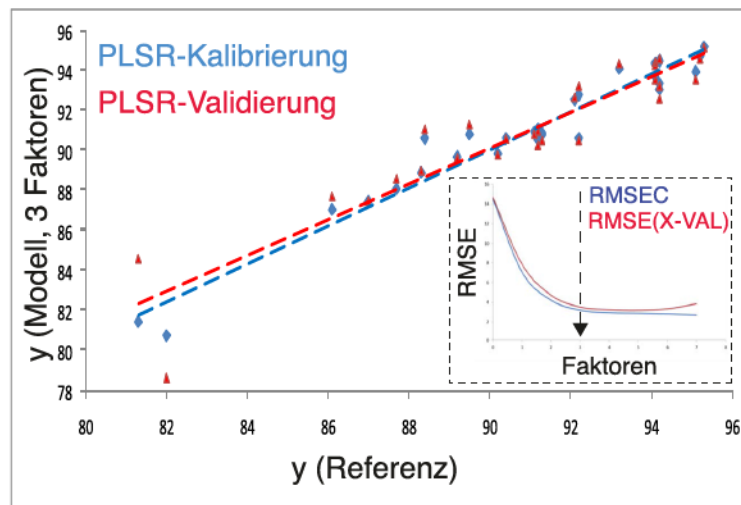


Abbildung 4.2: Beispiel eines PLSR-Modells. Grafische Gegenüberstellung der berechneten y -Werte (y -Modell) und der y -Referenzwerte aus der PLSR-Kalibrierung und der PLSR-Validierung. Zur Bestimmung der optimalen Faktorenzahl wurden der $RMSEC$ bzw. $RMSE(X-VAL)$ herangezogen.

4.3.2 Spektrale Interpretation der PLSR-Modelle

Die spektrale Interpretation der PLSR-Modelle diente der Suche nach den spektralen Einflüssen von potentiellen mineralogischen oder organischen Bodenbestandteilen (z.B.: bestimmte Minerale oder organische Verbindungen) sowie physikalischer bzw. makroskopischer Faktoren (z.B.: Korngröße), die dem jeweiligen Vorhersagemodell zugrunde lagen. Eine gewisse Analogie zu den

in der hyperspektralen Fernerkundung häufig gebrauchten *Endmembers* ist in diesem Zusammenhang nicht von der Hand zu weisen. Da sich diese spektralen Einflüsse hierbei jedoch auf die Modell-Zusammenhänge bezogen, wurden sie der englischen Literatur entsprechend als spektrale *Driver* (engl. *spectral drivers*) bezeichnet und im Folgenden mit *sD* abgekürzt.

Die Bestimmung der *sD* ging aus der Interpretation der Regressionskoeffizienten (*Rk*) bzw. der *W-loadings* hervor, die den Beitrag (Informationsgehalt) der einzelnen spektralen Bänder anzeigten, den sie zur Vorhersage eines Bodenparameters im Modell leisteten. In erster Linie kennzeichnen hohe Werte in den *Rk* bzw. den *W-loadings* (unabhängig vom Vorzeichen) diejenigen spektralen Bänder, die großen Einfluss auf den Zusammenhang mit der jeweiligen y-Variablen im Modell hatten (Esbensen, 2006). *W-loadings* aus unterschiedlichen Faktoren wurden nach ihrem Anteil an der erklärenden y-Varianz im Modell beurteilt. Um die dem Modell zugrunde liegenden spektralen *Driver* (*sD*) erkennen zu können, musste allerdings der gesamte Verlauf der *Rk* als Funktion der Wellenlänge in Betracht gezogen werden. *Rk* schlagen nicht zwangsläufig an den Wellenlängenpositionen der Absorptions-Maxima bzw. -Minima aus, die sich aus der Form der *sF* ergeben würden. In vielen Fällen favorisiert das Modell die Bänder hin zu oder aus solchen Extrempositionen heraus (z.B.: Absorptionsschultern), wo die *Rk* dann nahe null sind und eine Übergangsposition zwischen abfallendem und ansteigendem Einfluss bilden. Solche Übergangspositionen tauchen oft an Vorzeichenwechseln der *Rk* auf (vgl. die *Rk* am *sF* bei $10,95\ \mu\text{m}$ des MIDAC-Modells aus Abb. 7.3).

Zeigten die *Rk* des Modells (bzw. die *W-loadings* in den einzelnen Faktoren) als Funktion der Wellenlänge Übereinstimmungen mit den spektralen Charakteristika (*sF*) bekannter mineralogischer oder organischer Bodenbestandteile sowie physikalischer bzw. makroskopischer Faktoren, wurden diese als *sD* bezeichnet. Konnten die dabei identifizierten *sD* darüber hinaus mit dem vorhergesagten Bodenparameter in einen direkten Zusammenhang gebracht werden (z.B.: Quarz oder Korngröße als *sD* im Vorhersagemodell des Sandgehaltes), wurde das Modell als opto-physikalisch fundiert bezeichnet. Bei der Bestimmung der optimalen Anzahl der Faktoren eines *PLSR*-Modells wurde auf einen zusätzlichen Faktor auch dann verzichtet, wenn dessen *W-loadings* keinen solchen Zusammenhang erkennen ließen oder deutlichen Einfluss von Rauschen zeigten.

4.4 Beprobung und Analytik

Im Untersuchungsgebiet Mullewa wurden bei einer Feldkampagne im Februar 2010 Bodenproben entnommen. Dabei wurden aus zwei Beobachtungstreifen (Streifen-WEST und Streifen-OST, vgl. Abb. 3.4) insgesamt 120 Standorte beprobt (6 dieser Standorte befanden sich außerhalb der Streifen). An jedem Standort wurde eine möglichst homogene Kreisfläche mit einem Durchmesser von $15\ \text{m}$ ausgewählt. Innerhalb dieser Flächen wurden von verschiedenen, willkürlich gewählten Punkten ~ 500 Gramm Bodenmaterial aus den ersten zwei Zentimetern der Oberfläche gesammelt und eingetütet.

Die Beprobungsstrategie orientierte sich an den Voraussetzungen für das *ground-truthing* der fernerkundlichen Befliegung (HyMap), die parallel zur Feldkampagne stattfand. Der dabei erhobene hyperspektrale Datensatz (nicht Gegenstand dieser Arbeit) wurde mit einer typischen geometrischen Auflösung von 5 Metern aufgezeichnet. Um die Fehler zu kompensieren, die bei der genauen Verortung der Pixel (Georeferenzierung) entstehen, wurden drei mal drei Pixel große Untersuchungsflächen definiert, die den beprobten homogenen Kreisflächen (15 Meter Durchmesser) entsprachen. Um die Homogenität innerhalb der Kreisflächen später in den Befliegungsdaten

bewerten zu können, wurden einige der Standorte detailliert beprobt. Dabei wurden innerhalb der entsprechenden Untersuchungsflächen an 4 – 6 Stellen individuelle Bodenproben erzeugt.

Da nicht alle gesammelten Bodenproben analysiert bzw. mit jedem der Spektrometer gemessen werden konnten (vgl. Kap. 4.1), werden im Folgenden die sich daraus für die Arbeit ergebenden Datensätze beschrieben:

Alle Bodenproben wurden luftgetrocknet und gesiebt ($<1\text{ mm}$). Für alle 89 Bodenproben des Streifen-WEST (inklusive der 6 Proben, die außerhalb der Streifen lagen) wurde die Korngrößenverteilung durch Sieben und Sedimentation (Pipettverfahren nach Köhn, McKenzie et al. (2002)) bestimmt. Die folgenden Fraktionen wurden dabei gemessen: Ton ($<2\text{ }\mu\text{m}$), Schluff ($2\text{--}20\text{ }\mu\text{m}$), feiner Sand ($20\text{--}200\text{ }\mu\text{m}$) und grober Sand ($200\text{--}1000\text{ }\mu\text{m}$). Feiner und grober Sand wurden zur Fraktion Sand ($20\text{--}1000\text{ }\mu\text{m}$) zusammengefasst. Um den Einfluss organischer Bestandteile auf die Korngrößenverteilung ausschließen zu können, wurden diese zuvor mit Wasserstoffperoxid aus den Bodenproben entfernt. Der Gehalt an organischem Kohlenstoff (SOC, engl. *soil organic carbon*) wurde mittels der *Walkley Black* Methode (Walkley und Black, 1934) bestimmt. Für einen Teil der Bodenproben des Streifen-WEST und des Streifen-OST wurde der Chemismus und die Mineralogie mittels Röntgenfluoreszenz-Analyse (engl. *XRF*) bzw. Röntgendiffraktometrie (engl. *XRD*) ermittelt.

Datensatz	Proben- zahl (n)	Spektroskopie				Boden- Analytik	XRD /XRF
		thermal			solar-reflektiv		
		mFTIR	MIDAC	DHR	ASD		
WEST	89	JA	JA (87)	JA	JA	JA	JA (72)
W-FARM	57	JA	JA (56)	JA	JA	JA	JA (40)
OST-WEST	176	NEIN	JA (174)	JA	JA	NEIN	JA (148)

Tabelle 4.1: Zusammenfassung der Datensätze WEST, W-FARM und OST-WEST mit ihren Eigenschaften bzgl. ihres Umfangs an spektroskopischen und analytischen Informationen.

Daraus ergaben sich für die quantitative Analyse drei mögliche Datensätze, die mit ihren Eigenschaften in Tabelle 4.1 zusammengefasst sind. Der Datensatz WEST beinhaltet alle Bodenproben, die innerhalb des Streifen-WEST gesammelt wurden. Für die 89 Proben dieses Datensatzes standen sowohl die Daten zur Bodenanalytik sowie die Spektraldaten aus allen verwendeten Spektrometern zur Verfügung (für MIDAC nur 87 Proben). Der Datensatz WEST beinhaltet nicht ausschließlich Proben von Ackerflächen, sondern auch Proben von nicht-landwirtschaftlichen Flächen. Diese wurden beprobt, um die sonst sehr einförmig verteilte Bodencharakteristik um einige „extreme“ Proben zu erweitern. Außerdem enthält der Datensatz WEST die nicht gemittelten Proben der detaillierten Plots. Dieser Datensatz soll in der quantitativen Analyse nur am Rande Beachtung finden, um eine mögliche Erweiterung der Methoden zu diskutieren. Der Fokus soll vielmehr auf den 57 Bodenproben des Datensatzes W-FARM (für MIDAC nur 56 Proben) liegen, der ausschließlich Proben von Ackerflächen umfasst und außerdem Mittelwerte der detailliert beprobten Standorten beinhaltet. Der Datensatz OST-WEST umfasst insgesamt 174 Proben. Er umfasst neben dem Datensatz WEST alle im Streifen-OST beprobten Standorte. Für 148 Proben des Datensatzes OST-WEST wurde der Chemismus sowie die Mineralogie mittels XRF bzw. XRD untersucht.

Kapitel 5

Ergebnisse der Analytik

Die aus der Bodenanalytik resultierenden Bodenparameter Sand-, Ton- und SOC-Gehalt, die für die quantitative Modellierung verwendet wurden, finden in Tabelle 5.1 ihre statistische Beschreibung. Der sich komplementär aus Sand- und Tongehalt ergebende Schluffgehalt findet hier wie auch in der quantitativen Modellierung keine Berücksichtigung (vgl. Kap. Diskussion 8). Die entsprechende deskriptive Statistik, die aus der XRF-Analyse resultierte, befindet sich im Anhang (vgl. Tabelle C.1).

Parameter	Daten-satz	Proben-satz	n	Mean	SD	Max	Min	Median	Q1	Q3
Sand-gehalt (%)	WEST	ALL	89	88.44	14.69	95.30	14.30	92.70	90.25	94.20
	W-FARM	ALL	57	90.52	5.36	95.30	67.20	92.10	89.50	93.30
		VPS: >85 %	41	91.67	2.65	95.30	85.50	92.20	90.20	93.82
Ton-gehalt (%)	WEST	ALL	89	9.09	10.71	68.40	3.80	5.90	4.90	7.90
	W-FARM	ALL	57	7.68	4.05	25.50	3.80	6.80	5.70	8.70
		VPS: <15 %	48	6.76	2.06	12.60	3.80	6.80	5.14	7.83
SOC-Gehalt (%)	WEST	ALL	87	0.46	0.25	1.12	0.06	0.42	0.31	0.60
	W-FARM	ALL	57	0.51	0.22	1.12	0.17	0.46	0.34	0.60
		VPS	54	0.48	0.19	1.11	0.17	0.45	0.33	0.57

Tabelle 5.1: Beschreibende Statistik der Bodenparameter der jeweiligen Daten-/Probensätze (VPS: Vergleichs-Probensatz): Probenzahl (n), Mittelwert (Mean), Standardabweichung (SD), Maximum, Minimum, Median, 25%-Quartil (Q1) und 75%-Quartil (Q3).

Die Boxplots der Textur-Parameter spiegeln den überwiegend stark sandigen Charakter der Böden im Untersuchungsgebiet Mullewa wider (vgl. Abb. 5.2). Vereinzelt auftretende tonreichere Ackerböden und im Besonderen die vergleichsweise stark tonhaltigen Böden der zusätzlich beprobten nicht-landwirtschaftlichen Flächen führten dabei zu den stark asymmetrisch verteilten Texturwerten in den Datensätzen WEST-ALL bzw. W-FARM-ALL. In der quantitativen Modellierung wurden aus diesem Grund schrittweise in Richtung der Hauptverteilung reduzierte Datensätze berücksichtigt. Dabei ergab sich unter anderem der Vergleichs-Probensatz (W-FARM-VPS). Er bildet die Basis für die Gegenüberstellung der Ergebnisse des spektralen *Resamplings* sowie für den Vergleich der Ergebnisse aus der thermalen und solar-reflektiven Sensorik (vgl. Kap.7). Die Boxplots des SOC-Gehaltes zeigen dagegen vergleichsweise geringe Unterschiede in den jeweiligen Datensätzen (vgl. Abb. 5.1). Tabelle 5.3 zeigt die Kreuz-Korrelationen der drei Bodenparameter und verdeutlicht den großen Zusammenhang zwischen den Textur-Parametern.

Aus der XRD-Analytik resultierte Quarz als das dominierende Mineral. Unter den Tonmineralen war Kaolinit vorherrschend, in geringerem Maße waren auch Montmorillonit und Illit in den Bodenproben vorhanden. Rutil (TiO_2) konnte in der Mehrheit der Proben deutlich nachgewiesen werden. Außerdem zeigte sich in den meisten Proben Spuren von Hämatit, Goethit sowie

von Feldspaten (Anorthit, Orthoklas und Albit). Vereinzelt traten in Proben auch Calcit und Dolomit auf. Die Bodenproben zeigten damit den typischen pedologischen und mineralogischen Charakter des West-Australischen Weizengürtels.

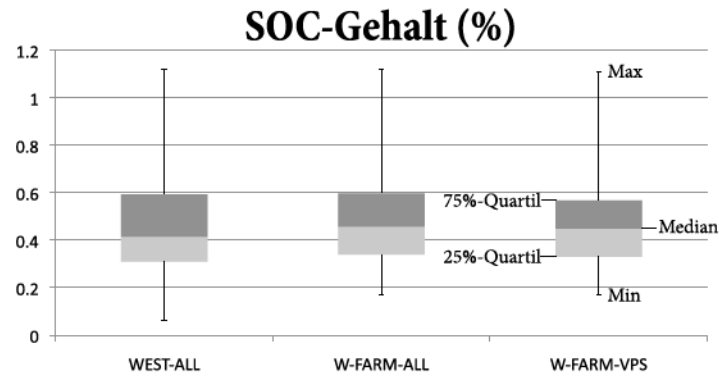


Abbildung 5.1: Boxplots des SOC-Gehaltes für die Daten- /Probensätze WEST, W-FARM und W-FARM-VPS.

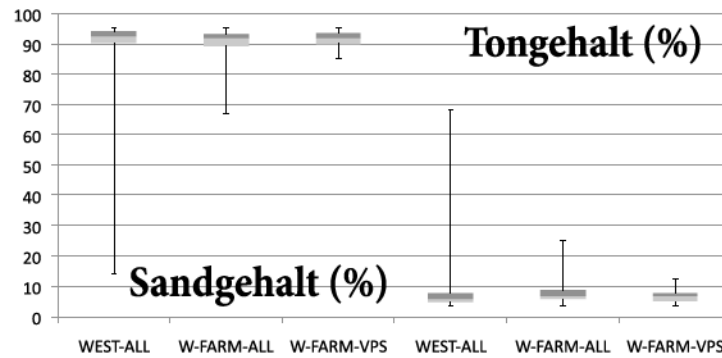


Abbildung 5.2: Boxplots der Textur-Parameter für die Daten-/Probensätze WEST, W-FARM und W-FARM-VPS.

	SOC (%)	Ton (%)	Sand (%)
SOC (%)	1.0000	0.5046	-0.5509
Ton (%)	0.5046	1.0000	-0.9701
Sand (%)	-0.5509	-0.9701	1.0000

Abbildung 5.3: Kreuz-Korrelationen der Bodenparameter SOC-, Ton- und Sandgehalt für den Datensatz W-Farm-VPS.

Kapitel 6

Ergebnisse der spektralen Interpretation

Im Folgenden werden die Bodenspektren vorgestellt und diskutiert, wie sie aus den Messungen der unterschiedlichen Spektrometer hervorgingen. Dazu wurde eine Auswahl von vier Bodenproben verwendet (cp22-x1, mu01, mu037 und mu043), die mit allen verwendeten Spektrometern gemessen wurden und die Variabilität der Bodenparameter repräsentieren. Zusätzlich dienen zwei Referenz-Quarzsande dem Vergleich. Nur in einem der Spektrallabore (ITC, MIDAC Spektrometer) standen beide Referenz-Quarzsande gleichzeitig zur Verfügung:

- Referenz-Quarzsand *Merck*: gewaschen und gegläht, $\sim 99,95$ % SiO_2 , LOI (Glühverlust, engl. *Loss On Ignition*) < 0.05 %, Korngröße: $200 - 800 \mu\text{m}$.
- Referenz-Quarzsand *Cook*: $99,5$ % SiO_2 , LOI < 0.05 %, Korngröße: $100 - 500 \mu\text{m}$, (Hecker et al., 2011).

Abbildung 6.1 zeigt die Auswahl an Bodenspektren wie sie aus den Messungen der diffusen *VNIR-SWIR*-Reflexions-Spektroskopie (ASD) im Spektrallabor des CSIRO hervorgingen. Im selben Labor wurde auch die ε -FTIR-Spektroskopie (μ FTIR) durchgeführt. Die dazugehörigen Bodenspektren zeigt Abbildung 6.2a. Die beiden Messungen folgten unmittelbar aufeinander und zwischen den Messungen fand keine Neuschüttung der Proben statt. Die Unterschiede beschränkten sich damit auf den Messfleck (*GfOV*) der Systeme und auf die Orientierung der Bodenprobe. Die Bodenspektren, welche am ITC mittels ε -FTIR-Spektroskopie (MIDAC) gemessen wurden, sind in Abbildung 6.2c zusammengefasst. Hierbei konnten beide Referenz-Quarzsande (*Merck* und *Cook*) gemessen werden. Die im Spektrallabor des GFZ gemessenen DHR-Spektren (Spectrum GX/P&E) zeigt Abbildung 6.3. Das starke Rauschen in den DHR-Spektren zwischen $4,2 - 4,4 \mu\text{m}$, resultiert aus der großen CO_2 -Bande im *MWIR*.

6.1 Spektrale Interpretation des *VNIR-SWIR*

Die gemessenen Bodenspektren zeigen *sF*, wie sie für die alten, stark verwitterten Böden in der semiariden Region Australiens typisch sind. Der *VNIR* wird bis $\sim 1,3 \mu\text{m}$ von den *sF* der Eisenoxide (Hämatit) und Eisenhydroxide (Goethit) bestimmt (vgl. Abb. 6.1a), was angesichts der kräftigen braun-roten bzw. braun-gelben Farbtöne der Böden zu erwarten war. Aufgrund der meist breiten und flachen Ausprägung dieser *sF* lassen sich die Absorptionsbanden im *VNIR* oft nur vage an bestimmten Wellenlängenpositionen festmachen. Daher werden sich in der Literatur oft nur näherungsweise angegeben und weichen meist geringfügig voneinander ab. Für Hämatit findet man hier mehrheitlich die *sF* bei $\sim 0,55 \mu\text{m}$, bei $\sim 0,63 \mu\text{m}$ und bei $\sim 0,88 \mu\text{m}$, die für Goethit bei $\sim 0,48 \mu\text{m}$, bei $\sim 0,65 \mu\text{m}$ und bei $\sim 0,92 \mu\text{m}$ (Hunt et al., 1971; Bartholomeus et al., 2007; Richter et al., 2009). Liegen darüber hinaus noch Mineralmischungen vor (wie sie typisch sind für Hämatit und Goethit) wird eine diskrete Beschreibung der *sF*, wie sie im *SWIR* oder

LWIR möglich ist, im *VNIR* zusätzlich erschwert. Das *sF* von Goethit bei $\sim 0,48 \mu\text{m}$ zeigte sich in diesem Zusammenhang in den untersuchten Bodenspektren als ungewöhnlich konstant und diskret.

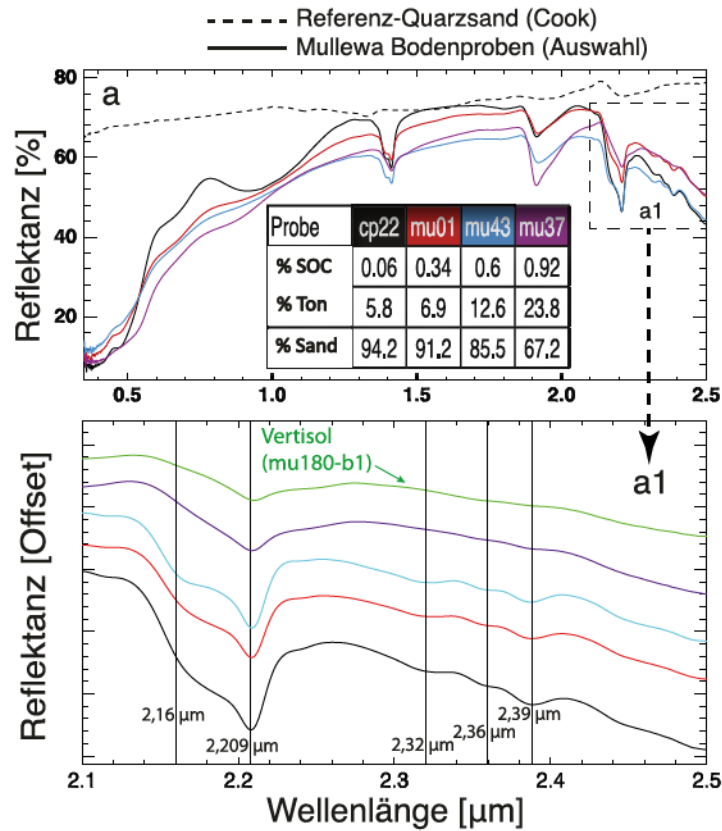


Abbildung 6.1: Reflektanzen ausgewählter Bodenspektren im *VNIR-SWIR*, aus den diffusen Reflexions-Messungen (ASD) sowie die gemessenen Bodenparameter aus der Analytik (% Ton, % Sand und % SOC), in Abb. (a). Abb. a1 zeigt einen Vergrößerung des *SWIR*. Das grüne Spektrum repräsentiert einen der wenigen Vertisole (mu180-b1), die südlich des Untersuchungsgebietes zusätzlich beprobt wurden.

Aus den Ergebnissen der Röntgendiffraktometrie (*XRD*) lassen sich jedoch nur Spuren dieser eisenhaltigen Minerale nachweisen. Die *XRD* basiert auf gemahlenen Bodenproben (Korngröße $< 20 \mu\text{m}$). Da in den spektralen Signaturen die Präsenz der Eisenoxide/-hydroxide offensichtlich ist, wird deren Konzentration in der Umhüllung der Bodenkörner (engl. *coatings*) vermutet, deren Einfluss bei der *XRD* im Volumen des Korns unterging.

Im *SWIR* zeigt sich für den Großteil der Spektren bei $\sim 2,2 \mu\text{m}$ die typische Kaolinit-Doppelbande mit ihrem Schulter-Reflektanz-Minimum bei $2,16 \mu\text{m}$ und ihrem *Feature*-Reflektanz-Minimum bei $2,209 \mu\text{m}$. Bei einigen der Bodenspektren (z.B.: mu37, mu180-b1) fehlt diese Schulter und das *sF* fällt direkt zum *Feature*-Reflektanz-Minimum hin ab. Die für Kaolinit charakteristische steile langwellige *Feature*-Wand ist deutlich abgeflacht und öffnet sich langwellig. Zudem fehlen diesen Spektren drei weitere typische Kaolinit-*Feature* bei $\sim 2,32 \mu\text{m}$, bei $\sim 2,36 \mu\text{m}$ und bei $\sim 2,39 \mu\text{m}$. Diese spektralen Merkmale lassen auf Beimengungen von anderen Tonmineralen, wie Montmorillonit und Illit schließen. Die Ergebnisse der *XRD* bestätigen diese Mineralogie. Abbildung 6.1a1 veranschaulicht diese Variabilität in einem vergrößerten Ausschnitt des *SWIR*. Das grüne Spektrum repräsentiert dabei einen der wenigen Vertisole (mu180-b1), die zusätzlich außerhalb des Untersuchungsgebietes beprobt wurden.

Eisenhaltige Minerale, wie Hämatit oder Goethit, sind wie das Tonmineral Kaolinit in den meisten Australischen Böden zu finden (auch wenn die Dominanz der Eisenoxide/-hydroxide aufgrund der *coatings* oft nur spektral evident ist). Sie sind neben Quarz unter den wenigen Mineralen, die auf dem intensiv verwitterten und ausgelaugten Australischen Mantel zurückblieben (McKenzie et al., 2004). In den sandigen Böden von Mullewa ist Quarz im überwiegenden Maße vorhanden, was auch die hohen Gehalte an SiO_2 aus der *XRF*-Analyse belegen. Doch Quarz zeigt weder im *VNIR* noch im *SWIR* brauchbare *sF*, wie das Spektrum des Referenz-Quarzsandes Cook in Abbildung 6.1a verdeutlicht.

6.2 Spektrale Interpretation des *LWIR*

Im Gegensatz zum *VNIR-SWIR* offenbart Quarz im *LWIR* diagnostische *sF* mit hohen spektralen Kontrasten. Sie werden innerhalb der dominanten Reststrahlenbänder (*RB*) zwischen 7,5 und 12,3 μm sichtbar, die aus den Fundamental-Schwingungen der SiO_2 -Bindungen resultieren. Am kurzwelligen und am langwelligen Ende der *RB* befindet sich jeweils ein Christiansen-Frequenz-Feature (*CFF*), an denen die Werte der Emissivität nahe 1.0 liegen (vgl. Kap. 2.3.2). Diese spektralen Eigenschaften im *LWIR*, die auf den SiO_2 -Bindungen basieren, liegen allen gemessenen Bodenspektren erkennbar zugrunde (vgl. Abb. 6.2 und Abb. 6.3). Die im Folgenden beschriebenen *sF* des *LWIR* konnten für alle verwendeten FTIR Spektrometer (μFTIR , MIDAC und Spectrum GX P&E) identifiziert werden und stimmten in ihren Wellenlängenpositionen überein. Da im *LWIR* keine markanten *sF* für organisches Material in Erscheinung treten (vgl. Kap. 2.4.2), werden sie in der folgenden Beschreibung nicht berücksichtigt. Sie werden im Zusammenhang mit der Interpretation der PLSR-Modelle diskutiert.

Quarz

Beide Referenz-Quarzsande zeigen die charakteristische ε -Doppelbande von Quarz (zwei markante Flügel) zwischen 8 und 9,5 μm mit einem ε -Max bei $\sim 8,63 \mu\text{m}$. Dieses ε -Max ist derart bestimmend, dass es bis in die tonreichsten Bodenproben (vgl. Probe: mu37) deutlich erhalten bleibt. Außerdem ist die zweite ε -Doppelbande von Quarz zwischen 12 und 14 μm (ε -Max bei $\sim 12,63 \mu\text{m}$) in den Spektren der Referenz-Quarzsande evident. Wegen ihres geringeren spektralen Kontrastes, verliert diese Doppelbande bei abnehmendem Sandgehalt (bzw. SiO_2 -Gehalt) der Bodenproben an Deutlichkeit. Beide Christiansen-Frequenz-Feature (*CFF*) treten an den für SiO_2 typischen Wellenlängenpositionen bei 7,5 μm und bei 12,3 μm auf.

Tonminerale

Schon geringe Mengen an Tonmineralen in den Bodenproben lassen aus der ε -Doppelbande eine ε -Tripelbande werden. Dabei schnürt sich innerhalb des zweiten Quarzflügels bei $\sim 9,0 \mu\text{m}$ ein weiterer Flügel ein. Neben Kaolinit besitzen auch Montmorillonit und Illit dieses *sF* (geringfügig langwellig verschoben), allerdings mit abgeschwächtem spektralen Kontrast (vgl. Abb. 2.12). Die *XRD*-Ergebnisse belegen die Dominanz des Tonminerals Kaolinit in den Bodenproben aus Mullewa. Zwei weitere diagnostische *sF*, die ausschließlich von Kaolinit erzeugt werden, unterstreichen dies: ein ε -Max bei $\sim 9,8 \mu\text{m}$ und ein breites ε -Max bei $\sim 10,5 \mu\text{m}$ bzw. einem ε -Min bei $\sim 10,95 \mu\text{m}$. An dieser Stelle sei noch einmal darauf hingewiesen, dass in den Abbildungen

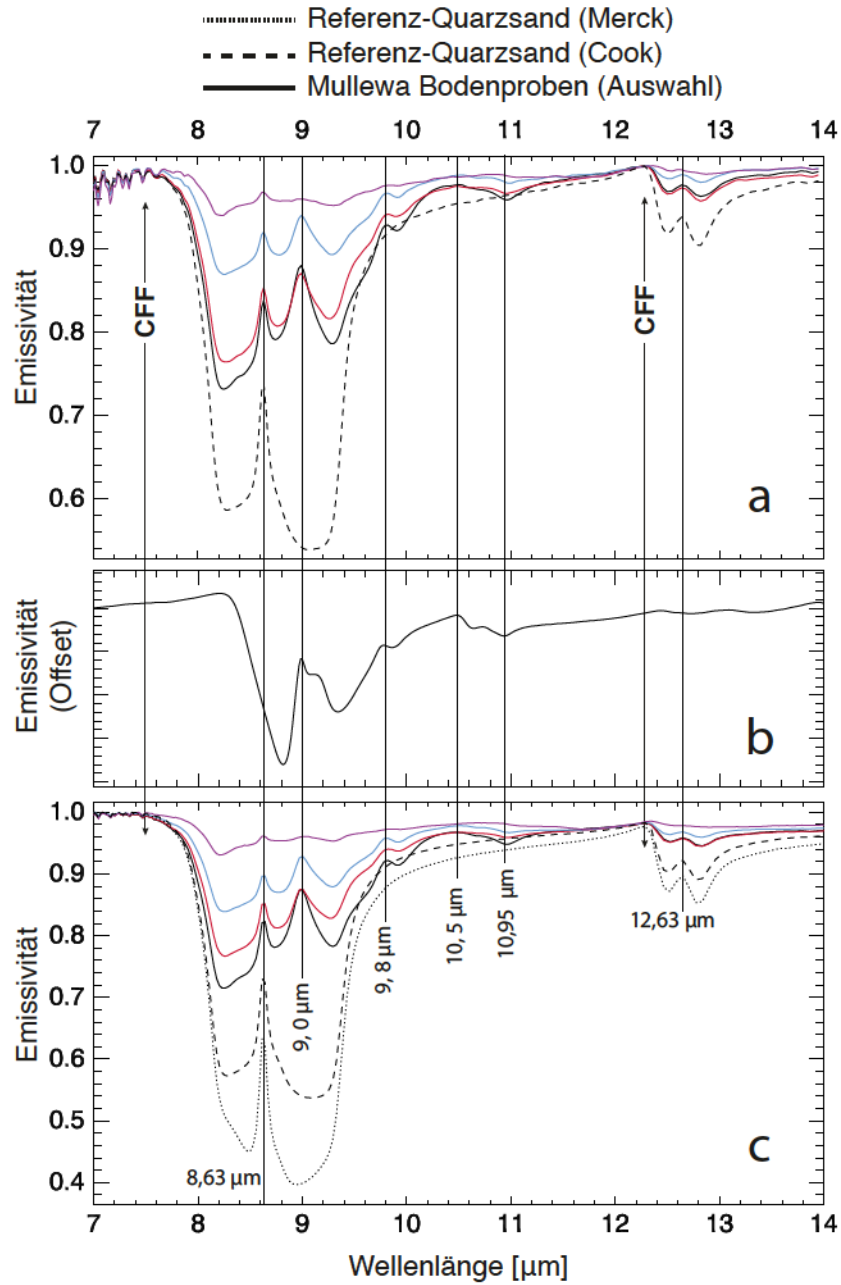


Abbildung 6.2: Emissivitäten ausgewählter Bodenspektren im *LWIR* aus den Messungen der ϵ -FTIR-Spektroskopie: a, μ FTIR (CSIRO) und c, MIDAC (ITC). b zeigt ein Referenz-Spektrum von Kaolinit (gepresst) aus der ASTER-Spektralbibliothek (Baldrige et al., 2009).

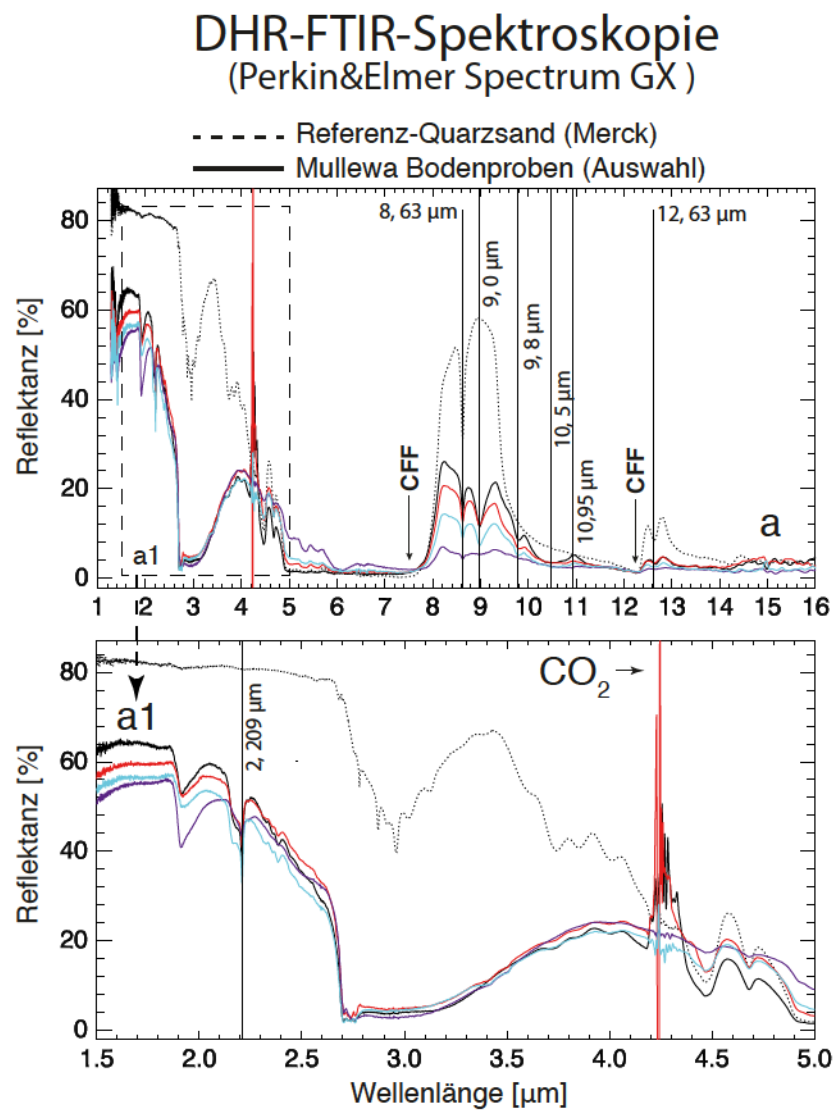


Abbildung 6.3: Reflektanzen ausgewählter Bodenspektren im *LWIR-MWIR-SWIR*, aus den Messungen der DHR-FTIR-Spektroskopie (Spectrum GX P&E) am GFZ: a, im ganzen spektralen Messbereich und b, den Ausschnitt im *SWIR-MIR*.

2.12 und 6.2 Referenz-Spektren von gepressten Mineralproben dargestellt sind, um den spektralen Charakter von grob texturiertem Material zu simulieren (vgl. Kap. 2.3.2). Bei feinkörnigem Bodenmaterial ergeben sich daher auch für Kaolinit teilweise veränderte sF , die in Kapitel 6.4 näher beleuchtet werden.

Eisenoxide/-hydroxide

Für die Eisenoxide/-hydroxide Hämatit und Goethit bietet das *LWIR* sehr viel weniger spektrales Potential als das *VNIR* (vgl. Kap. 2.4). Während Hämatit keine sF im *LWIR* zwischen 8 und 14 μm zeigt, besitzt Goethit zwei sF , eines bei $\sim 10,9 \mu\text{m}$ und ein weiteres bei $\sim 12,14 \mu\text{m}$ (vgl. Abb. 2.12). Das letztere konnte in keinem der Spektren nachgewiesen werden. Vermutlich wird es von dem dominanten *CFF* des Quarz unterdrückt, das sich in unmittelbarer Nähe dazu befindet ($12,3 \mu\text{m}$). Das sF bei $\sim 10,9 \mu\text{m}$ überschneidet sich mit einem der Kaolinit-*Feature* ($\sim 10,95 \mu\text{m}$). Da es sich (1) entsprechend der anderen sF von Kaolinit verhält und (2) sowohl in den braun-roten als auch den braun-gelben Proben sichtbar ist, kann davon ausgegangen werden, dass es sich hierbei um das sF von Kaolinit handelt. Die Ergebnisse der *XRD* konnten dazu keine weiteren Hinweise geben.

6.3 Vergleich der Spektren aus der thermalen Sensorik

Im Folgenden soll anhand der Messungen der Quarz-Referenzsande die Übertragbarkeit zwischen den verwendeten thermalen Spektrometern diskutiert werden. Die spektralen Unterschiede, die sich aus der Neuschüttung der Bodenproben ergaben, werden anschließend beleuchtet.

6.3.1 Beispiel: Quarz-Referenzsand Cook

Die Messungen des Quarz-Referenzsandes *Cook* mittels ε -FTIR-Spektroskopie unterstreichen die Übertragbarkeit zwischen den zwei verwendeten Spektrometern (μ FTIR und MIDAC) sowie die angewandten Methoden zur Prozessierung der Daten (Radiometrische Kalibrierung des Spektrometers, Korrektur der Hintergrundstrahlung sowie die Berechnung der Emissivitäten aus den Strahldichten).

Abbildung 6.4 zeigt die Emissivitäts-Spektren des Quarzsandes, wie sie aus den Messungen mit dem μ FTIR am CSIRO (schwarz) und dem MIDAC am ITC (rot) hervorgingen. Die charakteristische ε -Doppelbande von Quarz zwischen 8 und 9,5 μm ist für beide Spektren, bis auf geringfügige Abweichungen im ersten Quarzflügel, nahezu identisch. Die gute Übereinstimmung der Messungen aus den unterschiedlichen Spektrometern/Laboren ist zum einen auf die Homogenität des Quarz-Referenzsandes zurückzuführen. Hecker et al. (2011), aber zeigten für luftgetrockneten Cooksand, dass Wiederholungs-Messungen mittels DHR-FTIR-Spektroskopie mit wechselnden Umwelteinflüsse wie etwa der Luftfeuchtigkeit schwanken. Ein weiterer Grund für die gute Übereinstimmung lag daher in der Methodik der ε -FTIR-Spektroskopie selbst. Da die Proben unmittelbar vor den Messungen in einem Ofen erhitzt wurden und außerdem die Messzeiten relativ kurz waren, blieben merkliche Unterschiede in der Bodenfeuchte durch abweichende Adsorptionen aus der Luftfeuchte aus.

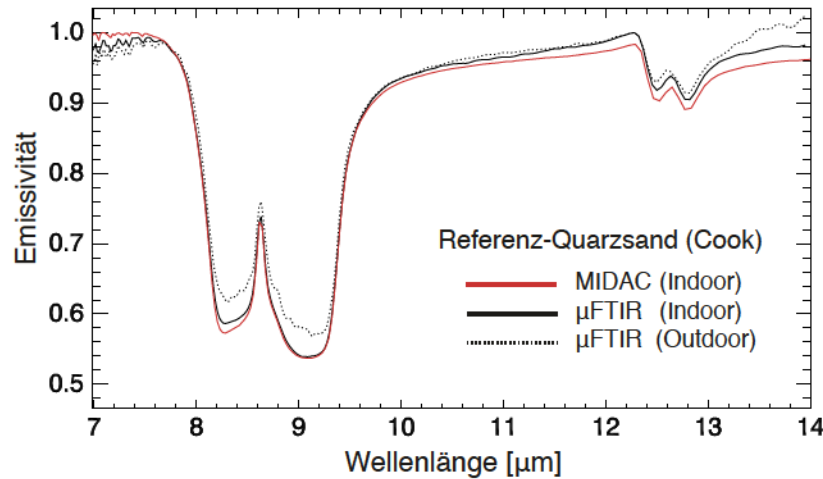


Abbildung 6.4: Emissivitäts-Spektren des Quarz-Referenzsand *Cook* aus der ε -FTIR-Spektroskopie, μ FTIR am CSIRO (schwarz) und MIDAC am ITC (rot). Gepunktet dargestellt ist ein μ FTIR-Spektrum, das im Freien unter atmosphärischem Einfluss aufgenommen wurde (die Probe wurde dafür nicht künstlich aufgeheizt).

Ab $\sim 10 \mu\text{m}$ kippt das MIDAC-Spektrum gegenüber dem μ FTIR-Spektrum etwas ab. Dieser Effekt gründet hauptsächlich auf den unterschiedlich definierten spektralen Bereichen, in den jeweils verwendeten *TES*-Algorithmen, wo ε_{max} auf 1.0 gesetzt wurde. Dafür kamen für die μ FTIR-Daten die Bereiche um beide *CFF* in Frage, weshalb das Spektrum an der Wellenlänge $\lambda_{\varepsilon_{\text{max}}} = 12,28 \mu\text{m}$ „eingehängt“ ist. Dieser Effekt wird in Kap. 6.3.3 am Beispiel der Bodenproben noch im Detail beleuchtet.

Das schwarz gepunktete Spektrum (μ FTIR-Outdoor) aus Abbildung 6.4 zeigt eine μ FTIR-Messung des Cooksand im Freien unter atmosphärischem Einfluß außerhalb des CSIRO bei Sonnenhöchststand und Strahlungswetter (die Probe wurde dafür nicht künstlich aufgeheizt). Der Vergleich mit den Laborspektren verdeutlicht zwei Effekte, die bei Messungen im Freien im Allgemeinen auftreten:

1. Die scharfen Absorptions/-Emissionslinien des atmosphärischen Wasserdampfes werden innerhalb der Quarz- ε -Doppelbande zwischen 8 und 9,5 μm sichtbar (die markante Ozon- ε -Doppelbande zwischen 9,2 und 10 μm ist in den Spektren nicht zu erkennen). Die Emissions-Minima innerhalb der Quarz-*RB* sind gemäß des Gesetzes von Kirchhoff (vgl. Kap. 2.2.1) Reflexions-Maxima und somit begünstigt für die Reflexion des Wasserdampfes in diesem Spektralbereich (die Quarz- ε -Doppelbande ist dafür prädestiniert). Ein Phänomen, das in der Literatur als „filling-in“-Effekt der reflektierten Himmelsstrahlung bezeichnet wird, die Quarz- ε -Doppelbande in der gemessenen spektralen Strahldichte deutlich „aufgefüllt“ erscheinen lässt und auch nach Korrektur der *DWR* noch in den ε -Spektren sichtbar bleibt (Salisbury, 1998; Hook et al., 1999).
2. Eine Reduktion der Intensität der ε -Doppelbande von Quarz. Dieser Effekt wird auf die Wasser-Adsorption der Probenoberfläche durch die Luftfeuchtigkeit zurückgeführt, welche die Reflexionswerte reduziert (bzw. ε -Werte erhöht) (Salisbury und D’Aria, 1992b). Durch das Erhitzen der Proben im Ofen wird über den luftgetrockneten Zustand hinaus Bodenfeuchte entfernt. Die Reflektanzwerte der erhitzten Proben liegen daher immer über

den der luftgetrockneten. Hecker et al. (2011) verweisen in diesem Zusammenhang auf die Empfindlichkeit von partikulärem Standard-Material bei veränderter Luftfeuchtigkeit.

6.3.2 Beispiel: Quarz-Referenzsand Merck

Die Spektren des Quarz-Referenzsandes *Merck*, die am ITC mit dem MIDAC (ε -FTIR-Spektroskopie) und am GFZ mit dem Spectrum GX (DHR-FTIR-Spektroskopie) gemessen wurden, sind in Abbildung 6.5 dargestellt. Die Spektren zeigen große Übereinstimmung im Bereich der ε -Doppelbande von Quarz. Die geringfügig niedrigeren Reflektanzwerte der DHR-Spektren werden auf den Einfluss erhöhter Bodenfeuchte bei der Messung zurückgeführt. Obwohl die DHR-FTIR-Spektroskopie in einem klimatisierten Raum stattfand, in dem auch die Bodenproben aufbewahrt wurden, zeigte sich der Einfluss der Luftfeuchtigkeit gegenüber der ε -FTIR-Spektroskopie. Die durch Adsorption geringfügig erhöhte Bodenfeuchte reduzierte die Reflektanz der DHR-Spektren, sodass auch hier das Reflektanz-Spektrum der erhitzten Probe über dem Spektrum der luftgetrockneten Probe liegt.

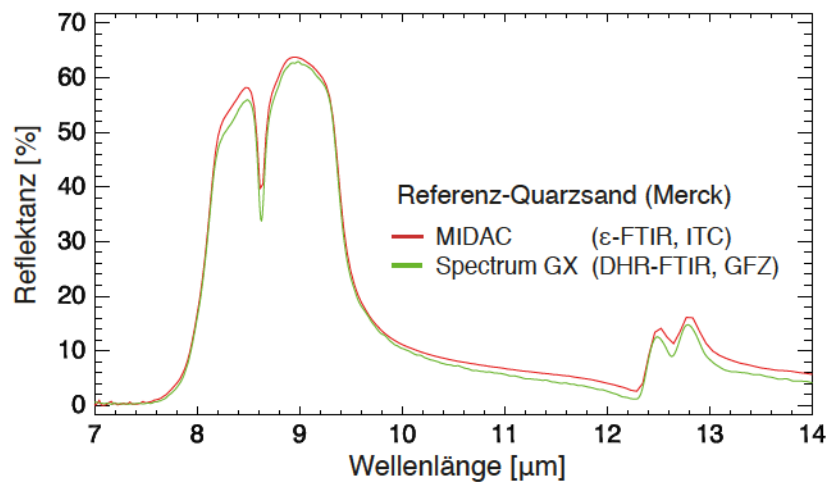


Abbildung 6.5: Reflektanz-Spektren des Quarz-Referenzsandes *Merck* aus der ε -FTIR-Spektroskopie (MIDAC, rot) und aus der DHR-FTIR-Spektroskopie (Spectrum GX, grün).

Ab $\sim 10 \mu\text{m}$ kippt das MIDAC-Spektrum gegenüber dem DHR-Spektrum etwas auf. Ein möglicher Grund für diesen *tilt-* oder *ramp-*Effekt wird im Zusammenhang mit der Proben temperatur vermutet und wird in Kapitel 6.3.4 diskutiert.

6.3.3 Beispiel: Mullewa Bodenproben (Auswahl)

Die naturgemäß inhomogene Materialzusammensetzung der Bodenproben zeigte sich zwangsläufig beim Vergleich der Spektren aus den verschiedenen thermalen Spektrometern (μ FTIR, MIDAC und Spectrum GX P&E). Die Unterschiede werden auf die zwangsläufig erforderliche Neuschüttung der Bodenproben vor jeder Messung zurückgeführt. Außerdem werden die Unterschiede zwischen den thermalen Messmethoden sowie der *TES*-Algorithmen im Vergleich sichtbar.

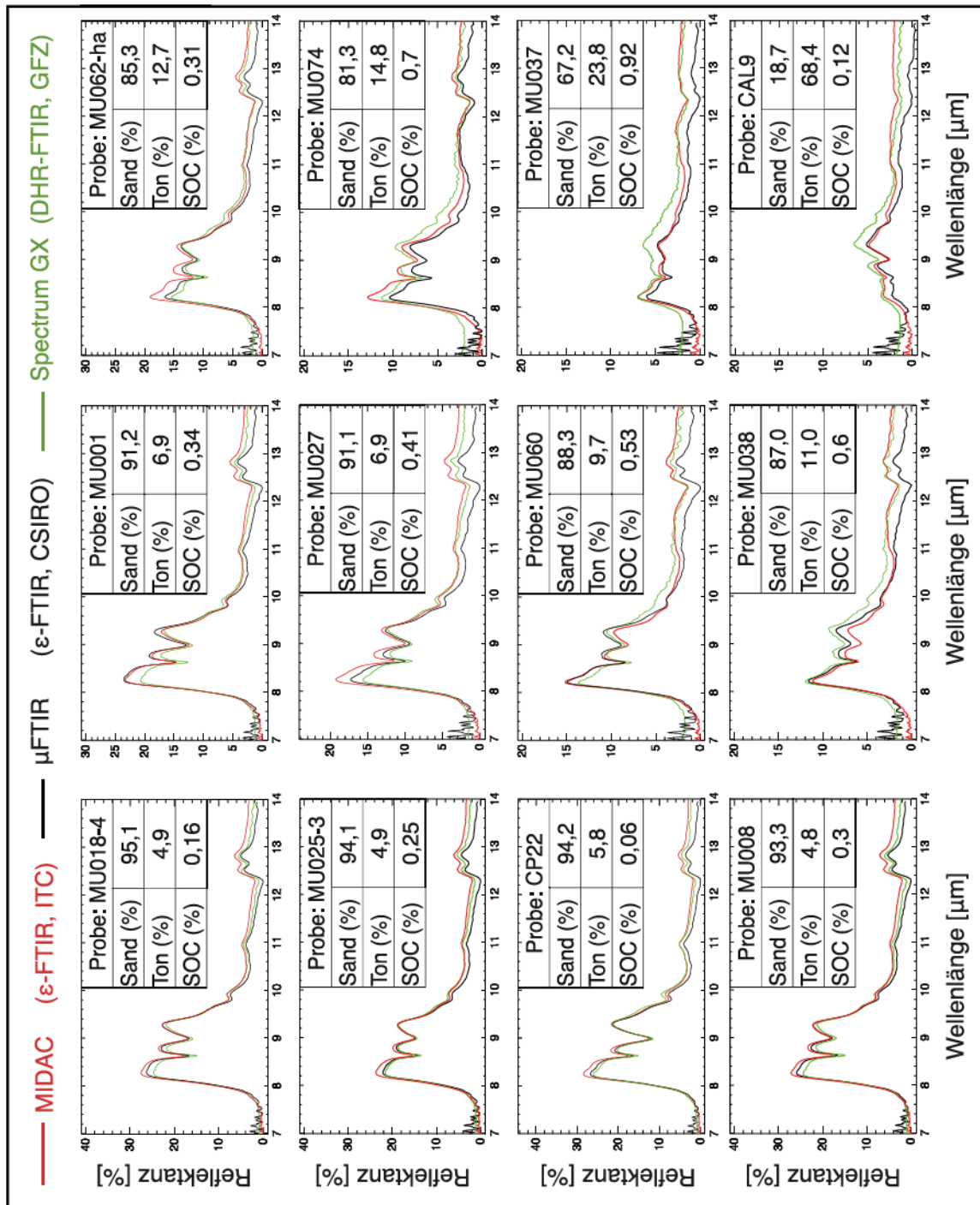


Abbildung 6.6: Auswahl von 12 Bodenspektren aus der thermalen Sensorik (μ FTIR, MIDAC und Spectrum GX), spaltenweise geordnet absteigend nach ihrem Sandgehalt.

Wie bereits in Kapitel 6.2 gezeigt, stimmen die Wellenlängenpositionen der sF für alle thermalen Spektrometer überein. Unterschiede zeigen sich vor allem in den Intensitäten der spektralen Signaturen. Abbildung 6.6 veranschaulicht diese Abweichungen anhand von 12 ausgewählten Bodenspektren aus allen verwendeten thermalen Spektrometern. Die Bodenspektren sind absteigend nach ihrem Sandgehalt geordnet. Der Vergleich der Ergebnisse der thermalen Sensorik zeigt:

- 1.) **Reflektanz-Minimum aus der TES:** Während die MIDAC-TES das Reflektanz-Minimum ($\varepsilon_{max} = 1.0$) zwischen 7,0 und 7,5 μm setzte, wurde in der $\mu\text{FTIR-TES}$ dieser „Einhängepunkt“ in einem erweiterten spektralen Bereich zwischen 7,5 und 13 μm festgelegt (vgl. Kap. 4.1.1), was auch das zweite CFF bei $\sim 12,3 \mu\text{m}$ als Möglichkeit mit einbezog. Das relativ starke Rauschen der μFTIR -Spektren im Bereich des ersten CFF bei $\sim 7,5 \mu\text{m}$ verdeutlicht die Wahl des erweiterten spektralen Definitionsbereichs für die μFTIR -Daten. Mit wenigen Ausnahmen (vgl. MU74) setzte die $\mu\text{FTIR-TES}$ ε_{max} im Bereich des zweiten CFF bei 12,28 μm . Damit unterschied sich der „Einhängepunkt“ zwischen den MIDAC- und den μFTIR -Spektren in den meisten Fällen. Die Annahme $\varepsilon_{max} = 1.0$ verliert mit steigenden Gehalten an Ton und organischer Substanz ihre Gültigkeit (siehe Punkt 2.).
- 2.) **Steigende Reflektanzen an den CFF mit abnehmendem SiO_2 -Gehalt:** Mit abnehmendem Sandgehalt (bzw. der Abnahme des spektralen Einflusses von SiO_2) – und dem damit verbundenen erhöhten spektralen Einfluss von Tonmineralen und organischer Substanz – steigt die Reflektanz an den CFF. Die DHR-Spektren (grün) werden im Bereich der CFF als der „Wahrheit“ am nächsten liegend verstanden, da sie aus einer Reflexions-Messung hervorgingen und nicht wie im Fall der ε -FTIR-Spektroskopie über einen TES-Algorithmus an einem der beiden CFF „eingehängt“ werden mussten. Mit abnehmendem SiO_2 -Gehalt entfernt sich die im TES-Algorithmus getroffene Annahme ($\varepsilon_{max} = 1.0$) sukzessive von ihrer Gültigkeit. Abbildung 6.7 veranschaulicht dies anhand der DHR-Spektren (gleiche Proben wie in Abb. 6.6) im Bereich des CFF. Im engeren Sinne ist die getroffene Annahme auch für reinen Quarzsand nicht ganz korrekt. Die Reflektanzwerte für den Quarz-Referenzsand Merck (rot) liegen bei 7,5 μm bei $\sim 0,2 \%$, die der tonreichsten Probe (CAL9, grün) sogar bei 1,9 %. Die Abweichungen der μFTIR - und der MIDAC-Spektren von den „wahren“ DHR-Spektren sind demnach für Proben mit hohem Tongehalt größer. Abhängig vom gesetzten „Einhängepunkt“ am ersten oder am zweiten CFF stimmt das Reflektanz-Niveau am jeweils anderen CFF wieder mit dem der DHR-Spektren überein.
- 3.) **H_2O -Adsorption – Reduktion der Reflektanz:** Die oben beschriebene Reduktion des Reflektanz-Niveaus im Bereich des ersten Quarzflügels durch Adsorption aus der Luftfeuchte ist in den DHR-Spektren (grün) deutlich zu erkennen. Durch das Erhitzen der Proben im Ofen bei der ε -FTIR-Spektroskopie und der damit verbundenen Reduktion der Bodenfeuchte über das Maß des luftgetrockneten Zustandes hinaus, zeigen die μFTIR - und die MIDAC-Spektren hier höhere Reflektanzen. Ab einem Tongehalt von $\sim 10 \%$ verliert sich diese Ordnung aufgrund von Punkt (2). Durch eine Korrektur dieses *Offsets* könnte diese Ordnung wiederhergestellt werden.

6.3.4 Fehlerquelle 1: Temperatur-Empfindlichkeit

Eine mögliche Fehlerquelle, die einen *tilt*- oder *ramp*-Effekt verursachen kann, wird in der für die Extraktion der Emissivität verwendeten Temperatur vermutet. Daher sollte in diesem Versuch

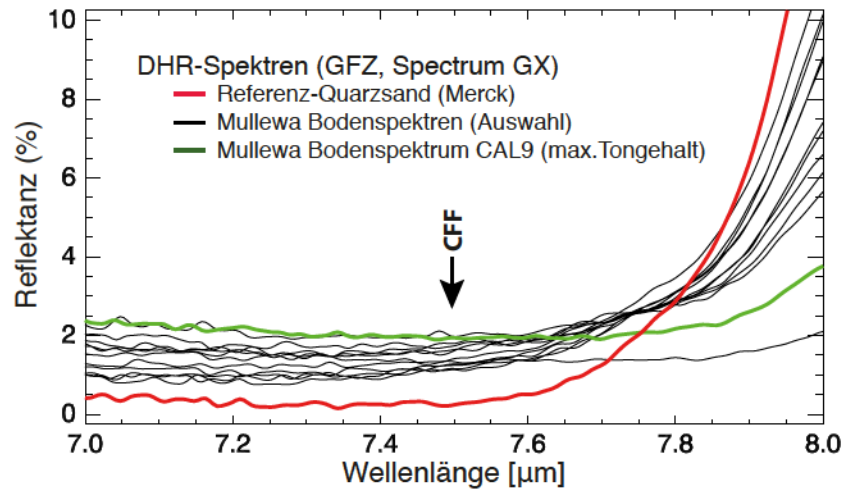


Abbildung 6.7: Steigende Reflektanzen an den CFF mit abnehmendem SiO_2 -Gehalt. DHR-Spektren der Bodenproben-Auswahl aus Abb. 6.6 als Ausschnitt des Spektralbereichs um das CFF bei $7,5 \mu\text{m}$.

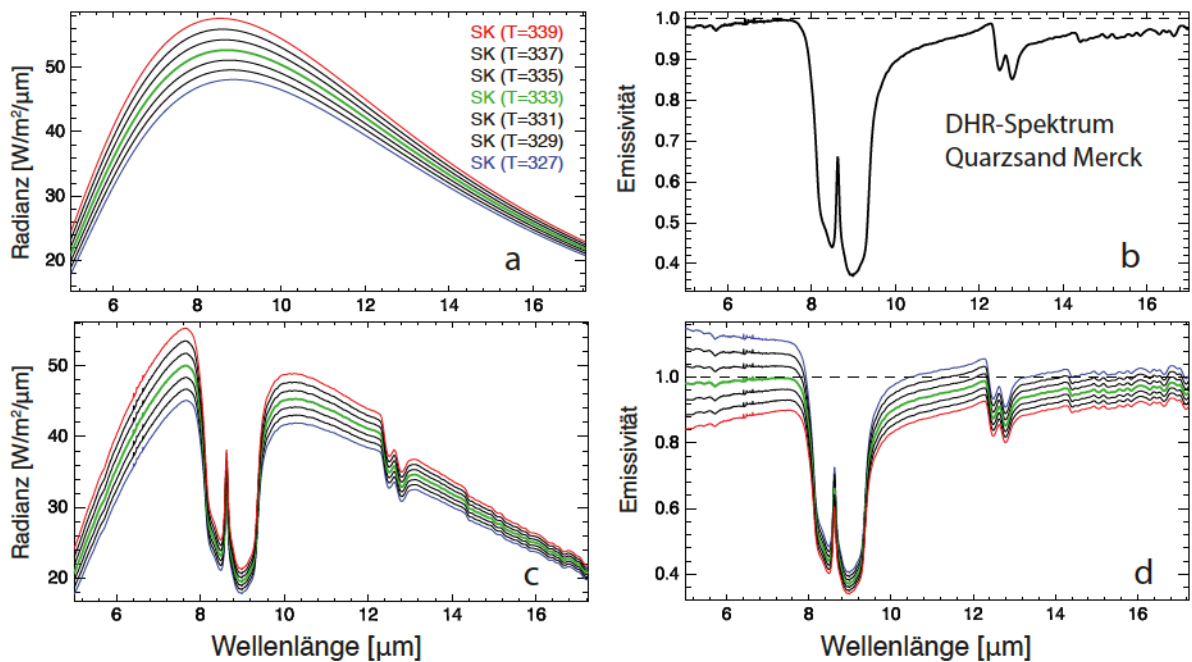


Abbildung 6.8: Temperatur-Empfindlichkeit bei der Berechnung der Emissivität. a: Berechnete Radianzen für Schwarzkörper (SK) unterschiedlicher Temperatur, b: Emissivität des Quarz-Referenzsandes *Merck* aus der DHR-FTIR-Spektroskopie, c: berechnete Proben-Radianzen, d: berechnete Emissivitäten auf Grundlage der Proben-Radianz der Referenz-Temperatur (333 Kelvin, grün).

geklärt werden, wie sich eine fehlerhaft abgeschätzte Proben-Temperatur aus der *TES* auf die Berechnung der Emissivität nach Gleichung 2.7 auswirken würde.

Die Temperatur-Empfindlichkeit sollte am Beispiel des Quarz-Referenzsand *Merck* beurteilt werden, wozu seine Emissivitätswerte aus der DHR-FTIR-Spektroskopie herangezogen wurden (vgl. Abb. 6.8b), für die der Einfluss der Temperatur ausgeschlossen werden konnte. Die „wahre“ Temperatur der Probe (Referenz-Temperatur) wurde in diesem Versuch auf 60 °C (333 Kelvin) festgelegt. Davon wurden in 2 °C Schritten je drei Temperaturen oberhalb und unterhalb der Referenz-Temperatur für die Herleitung der Emissivität untersucht (327 K, 329 K, 331 K, 333 K, 335 K, 337 K, und 339 K).

Zunächst wurden für diese sieben Temperaturen nach der Planckschen Formel (vgl. Gleichung 2.3) die spektralen Radianzen der Schwarzkörper berechnet (vgl. Abb. 6.8a). Nach Gleichung 2.7 wurde anschließend aus dem Produkt der Schwarzkörper-Radianzen und der spektralen Emissivität des Mercksandes die Proben-Radianzen der unterschiedlichen Temperaturen berechnet (vgl. Abb. 6.8c). Abschließend wurde auf Grundlage der Proben-Radianz der Referenz-Temperatur die Emissivitäten aus den unterschiedlichen Schwarzkörper-Radianzen berechnet, von denen demnach nur eine der Referenz-Temperatur entsprach (grünes Spektrum aus Abb. 6.8d).

Der Versuch veranschaulicht wie eine falsch abgeschätzte Proben-Temperatur die Emissivitätswerte verzerrt: wird die Temperatur überschätzt, liegen die Emissivitätswerte zu niedrig, wird sie dagegen unterschätzt werden die Emissivitätswerte zu hoch angesetzt. Dabei wird in Frage gestellt, ob der *tilt*- oder *ramp*-Effekt aus Abbildung 6.5 demzufolge aus einer geringfügig zu hoch abgeschätzten Temperatur resultierte, da sich der Effekt aus der Temperatur-Empfindlichkeit als Offset zeigt.

6.3.5 Fehlerquelle 2: Abkühlung während der Messung

Eine weitere mögliche Fehlerquelle könnte die Abkühlung der Probe während der Messung gewesen sein. Dieser Effekt wurde für drei Proben (Quarz-Referenzsand *Merck*, Bodenproben: mu60 und mu74) am Beispiel der MIDAC-Daten untersucht, für die eine relativ lange Integrationszeit von 64 Scans gewählt wurde (vgl. Kap. 4.1.2). Neben den in der Arbeit verwendeten gemittelten Radianzen (über alle 64 Scans) wurden bei diesem Versuch auch der jeweils erste und letzte Scan in die Beobachtung mit einbezogen. Aus den Radianzen wurden unter Verwendung des MIDAC-*TES*-Algorithmus die Temperaturen abgeschätzt und die Emissivitäten berechnet.

Abbildung 6.9 zeigt die Ergebnisse dieses Versuches. Erwartungsgemäß zeigt sich die Abkühlung der Proben vom ersten (rotes Spektrum, relativ warm) zum letzten Scan (blaues Spektrum, relativ kalt) sowohl in den Radianz-Spektren als auch in den geschätzten Temperaturen (die Abkühlung zeigt außerdem ihre Abhängigkeit zur Korngröße und/oder Materialzusammensetzung als Folge der Unterschiede in den spezifischen Wärmekapazitäten). Für die über alle 64 Scans gemittelten Radianz-Spektren wurden in allen drei Fällen auch „gemittelte“ Temperaturen abgeschätzt, womit die Funktionalität des verwendeten *TES*-Algorithmus unterstrichen wurde.

Das Emissivitäts-Spektrum des Quarzsandes lässt keinen *tilt*- oder *ramp*-Effekt erkennen. Ein leichter Abfall zeigt sich in den Spektren der beiden Bodenproben nur für den jeweiligen Extremfall zwischen dem ersten und dem letzten, dem 64-zigsten Scan. Zu diesem Zeitpunkt waren die Proben in den Messungen maximal abgekühlt, der Effekt könnte daher auch aus dem erhöhten Rauschen aufgrund der geringeren Energie zustande gekommen sein.

Für die in der Arbeit verwendeten gemittelten Spektren (grün) ist kein *tilt*- oder *ramp*-Effekt durch die Abkühlung während der Messung zu erkennen. Form und Lage der gemittelten Spektren stimmen mit den Spektren, der jeweils zuerst aufgenommenen Scans überein, für welche die Abkühlung minimal war. Die Unterschiede beschränken sich dabei auf den reduzierten Rauschanteil wegen der erhöhten Integrationszeit.

6.4 Interpretation der Bodenspektren in Abhängigkeit der Größen ihrer pedologischen Parameter

Um die Bodenspektren im *LWIR* in Abhängigkeit von der Größe ihrer pedologischen Parameter (Textur und Gehalt an organischem Kohlenstoff) zu interpretieren, sollen noch einmal fünf der Spektren (MIDAC) aus Abbildung 6.6 herangezogen werden. Diese sind in Abbildung 6.10 aus Gründen der Anschaulichkeit in einem Diagramm zusammengefasst. Die Abbildung zeigt außerdem zwei Referenz-Spektren von Kaolinit, die der ASTER-Spektralbibliothek (Baldrige et al., 2009) entnommen sind - zum einen das bereits vorgestellte Spektrum von gepresstem Kaolinit (b), das in diesem Zustand den spektralen Charakter von grob texturiertem Material simuliert (vgl. Kap. 2.3.2) zum anderen darunter das Spektrum der gleichen Probe in ihrem natürlichen pulverförmigen Zustand mit einer Korngröße von 0 bis 2 μm (c). Die Auswahl umfasst Proben mit möglichst geringem Gehalt an SOC, um dessen spektralen Einfluss für die Interpretation zunächst gering halten zu können (für tonreichere Proben war dies zunehmend schwieriger zu realisieren). Verfolgt man den Verlauf der *sF* mit abnehmendem Sandgehalt, sind folgende Punkte zu beobachten:

Reduktion der *RB* mit abnehmender Korngröße: Die aus der Literatur bekannte Theorie (vgl. Kap. 2.3.2) zeigt sich bestätigt: Der spektrale Kontrast in den *RB* (Reflektanz-Niveau) wird mit abnehmendem Sandgehalt (abnehmenden Korngrößen) unterdrückt. Dabei bleiben die folgenden *sF* innerhalb der *RB* konstant in ihrer Wellenlängenposition: die *sF* von Quarz bei 8,63 μm und bei 12,63 μm sowie die *sF* von Kaolinit bei 9 μm und bei 9,8 μm .

Einfluss des Transparenz-Features als Folge der Volumenstreuung: Mit zunehmendem Tongehalt wächst der Einfluss der Volumenstreuung. Dadurch entsteht im Bereich zwischen $\sim 11 \mu\text{m}$ und $\sim 12 \mu\text{m}$ ein korngrößenabhängiges Transparenz-Feature (vgl. Kap. 2.3.2), welches die spektrale Dynamik schon ab $\sim 9,8 \mu\text{m}$ beeinflusst und die *sF* in diesem Wellenlängenbereich korngrößenabhängig modifiziert:

- Das *sF* von Kaolinit bei $\sim 10,95 \mu\text{m}$ verhält sich mit zunehmendem Tongehalt paradox und wird mit dem Einfluss des Transparenz-Features vermindert. Für reinen Kaolinit ist dabei zu beobachten, dass der Peak der grobkörnigen Probe bei $\sim 10,95 \mu\text{m}$ (Kaolinit gepresst, Abb. 6.10b1) in der pulverförmigen Probe (Abb. 6.10c1) zu einem Reflexions-Minimum abgefallen ist. Dieses markiert den Ausgangspunkt des Transparenz-Features, das sich von dort an bauchförmig aufwölbt und zum *CFE* hin, bei $\sim 12,3 \mu\text{m}$, wieder abfällt.
- In den Bodenspektren spiegelt sich dieses Verhalten bei abnehmender Korngröße wider (Abweichungen sind auf die Materialmischungen in den Bodenproben zurückzuführen), wobei dem *sF* bei $\sim 10,95 \mu\text{m}$ eine zentrale Rolle zukommt: Dessen Peak verschwindet sukzessive und ist in den feinkörnigen Proben nur noch ansatzweise erkennbar (was den noch relativ grobkörnigen Charakter der Böden demonstriert). In

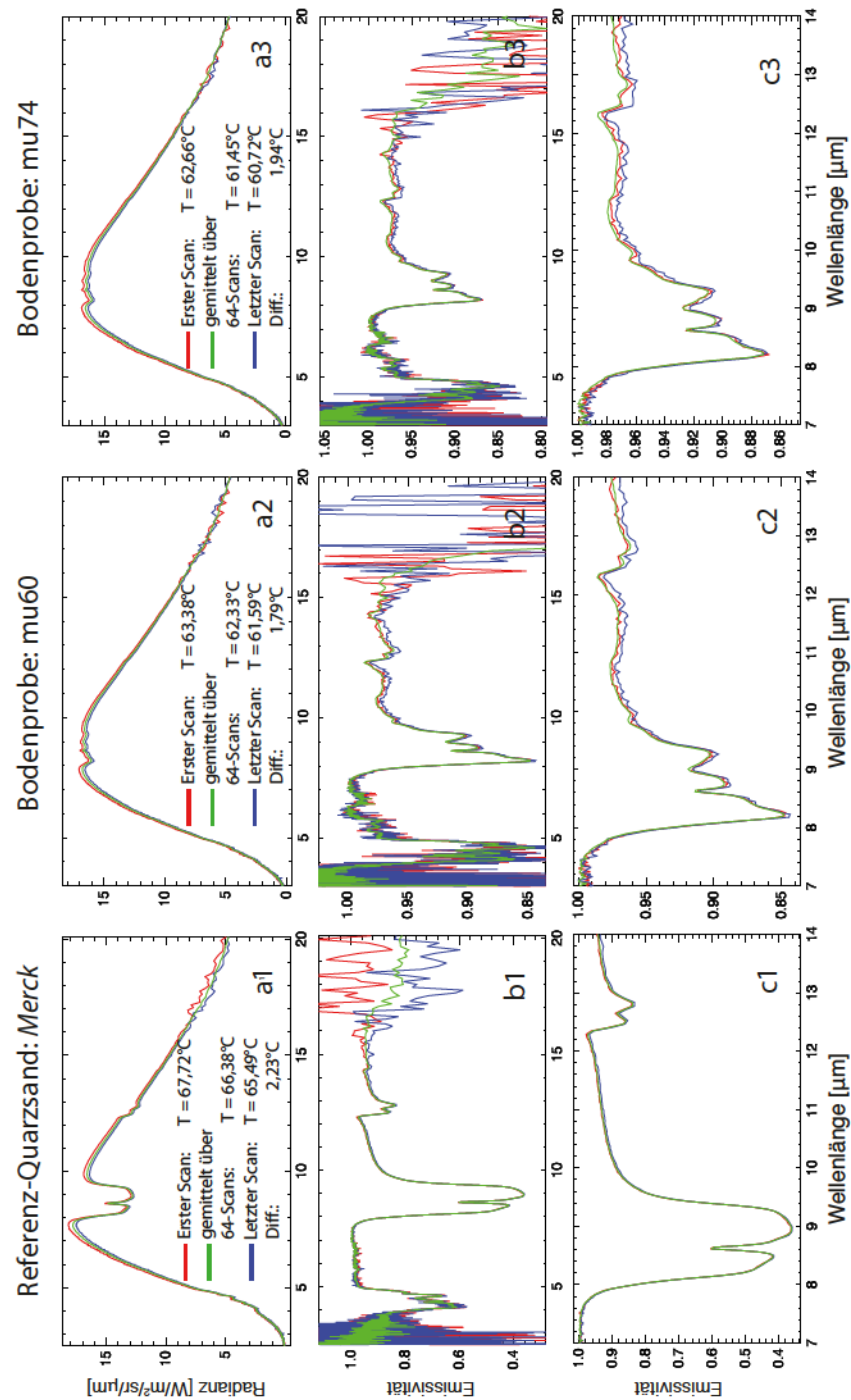


Abbildung 6.9: Abkühlungs-Effekt der Proben während der MIDAC-Messung: erster Scan (rot), letzter Scan (blau) und gemittelt über alle 64 Scans (grün). a: Radianz-Spektren und abgeschätzte Temperaturen aus der *TES*, b: berechnete Emissivitäten zwischen 3 und 20 μm , c: berechnete Emissivitäten zwischen 7 und 14 μm .

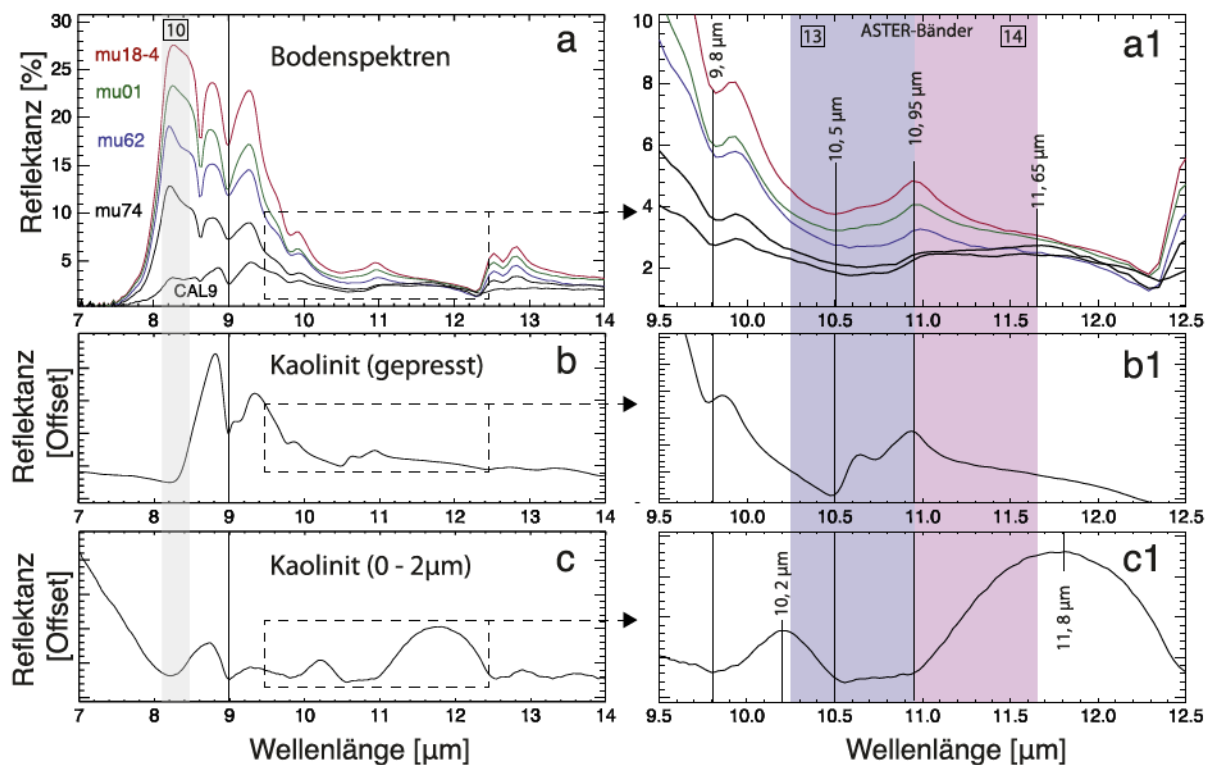


Abbildung 6.10: Einfluss der Korngröße auf die Reflektanz im *LWIR*. **a:** Auswahl von MIDAC-Bodenspektren (pedolog. Parameter dazu, siehe Abb. 6.6). Referenz-Spektren von Kaolinit aus der ASTER-Spektralbibliothek (gepresst), **b** und **c:** pulverförmig, Korngröße: 0 – 2 μm . Rechts davon jeweils der für die Prozesse der Volumenstreuung relevante spektrale Bereich.

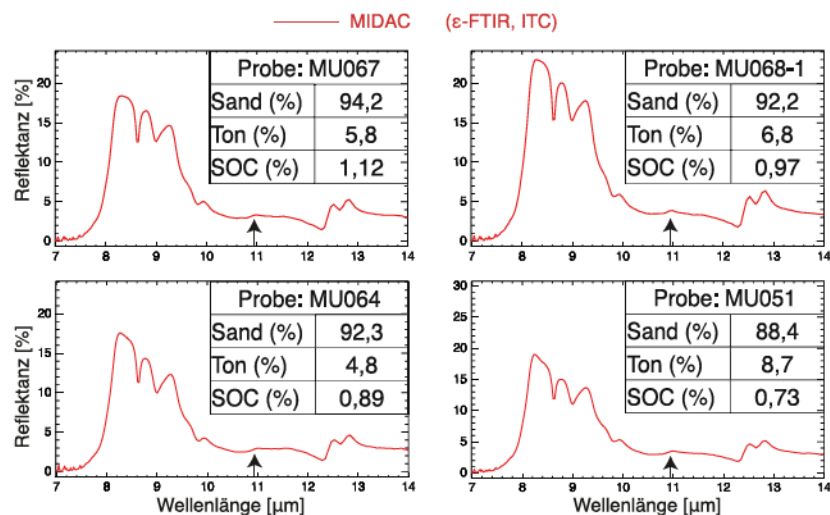


Abbildung 6.11: Einfluss des Transparenz-Features auf die Bodenspektren (MIDAC-Spektren) mit relativ niedrigen Tongehalten und gleichzeitig hohen Gehalten an SOC. Die Pfeile markieren die Position des Kaolinit-Features bei 10,95 μm .

Abhängigkeit der Korngröße wird die spektrale Dynamik im Bereich um dieses sF stark verändert, was sich im Anstieg/Abfall zu und von dem sF beobachten lässt (vgl. Abb. 6.10). Ab einem Tongehalt von $\sim 10\%$ ist das sF bei $\sim 10,95\ \mu\text{m}$ in den Spektren quasi nicht mehr evident (vgl. Abb. 6.6).

- Der Ausgangspunkt des Transparenz-Features ist in den Bodenproben etwas kurzwellig verschoben und wölbt sich schon ab $\sim 10,8\ \mu\text{m}$ auf. Bei $\sim 11,65\ \mu\text{m}$ lassen die Bodenspektren ein unscharfes Maximum des Transparenz-Features erkennen, dessen Wellenlängenposition materialabhängig ist und damit bereits den Unterschied zur Mineralogie von reinem feinen Quarz (Peak bei $\sim 11\ \mu\text{m}$, vgl. Abb. 2.10) sowie die Nähe zur Mineralogie von feinem Kaolinit (Peak bei $\sim 11,8\ \mu\text{m}$) belegt.
- Mit dem Einfluss des Transparenz-Features verändert sich auch das beschriebene Reflektanz-Minimum von Kaolinit bei $\sim 10,5\ \mu\text{m}$, das an dieser Position nur für grob texturierte Bodenproben erhalten bleibt und sich mit abnehmendem Tongehalt langwellig verlagert. Das sF von Kaolinit bei $\sim 9,8\ \mu\text{m}$ bleibt in diesem Zusammenhang nahezu konstant. Der Peak der pulverförmigen Kaolinit-Probe bei $10,2\ \mu\text{m}$ konnte in den Bodenspektren nicht beobachtet werden.

Das Transparenz-Feature als Konsequenz der Volumenstreuung repräsentiert den Einfluss feiner Korngrößen in den Bodenproben. Schon in Abbildung 6.6 war zu erkennen, dass das Auftauchen des sF von Kaolinit bei $\sim 10,95\ \mu\text{m}$ für die Bodenproben mit Tongehalten im Bereich von 10% auch mit dem Gehalt an SOC in Zusammenhang steht: So ist dieses sF beispielsweise in den Spektren der Proben MU060 (Tongehalt: $9,7\%$, SOC: $0,53\%$) und MU038 (Tongehalt: 11% , SOC: $0,6\%$) - mit relativ hohen Gehalten an SOC - quasi nicht mehr zu erkennen. Im Spektrum der Probe MU062-ha mit einem Tongehalt von $12,7\%$ und einem Gehalt an SOC von $0,31\%$ ist es dagegen trotzdem evident.

Abbildung 6.11 verdeutlicht diesen Zusammenhang nochmals anhand von vier tonarmen Bodenspektren mit relativ viel SOC. Trotz eines Tongehaltes von $<10\%$ ist der Einfluss des Transparenz-Features in den Spektren zu erkennen und das beschriebene sF von Kaolinit bei $\sim 10,95\ \mu\text{m}$ zeigt sich nur sehr schwach. Der Gehalt an SOC ist im organischen Material der Bodenproben gebunden, das hauptsächlich als Feinmaterial im Boden vorliegt (Brady et al., 1996). Auch bei größerem organischen Material könnte dieser Effekt durch eine relativ poröse Oberfläche entstehen.

Das in der Literatur beschriebene korngrößenabhängige spektrale Verhalten für den solar-reflektiven Wellenlängenbereich (vgl. Kap. 2.3.2) konnte in den Bodenspektren nur widersprüchlich beobachtet werden (vgl. Abb. 6.1). Während der spektrale Kontrast des sF bei $\sim 2,2\ \mu\text{m}$ eine Tendenz in Richtung des Verhaltens von Silikaten zeigte, verhielt sich das Niveau der Reflektanz (engl. *overall reflectance*) in den meisten Spektren gegenläufig, nach der Theorie von opaken Materialien. Ein Grund dafür, dass die Bodenspektren des VNIR-SWIR keine deutliche Korngrößenabhängigkeit zeigten, wird in dem starken Einfluss eisenhaltiger Minerale in Form von *coatings* gesehen.

6.5 Zusammenfassung und Fazit

Die spektrale Interpretation verdeutlichte wie stark die spektrale Signaturen der Böden im VNIR bis $\sim 1,3\ \mu\text{m}$ vom Einfluss der Eisenoxide/-hydroxiden dominiert wurden. Da mittels Röntgen-

diffraktometrie (*XRD*) jedoch nur Spuren dieser Minerale nachgewiesen werden konnten, wurde deren Konzentration in der Umhüllung der Bodenkörner (engl. *coatings*) vermutet, deren Einfluss durch das Mahlen der Proben für die *XRD*-Analyse im Volumen des Korn unterging. Im *SWIR* zeigten die Bodenspektren mehrheitlich die Kaolinit-Doppelbande bei 2,16/2,209 μm . Der Wellenlängenbereich des *VNIR-SWIR* bot keine brauchbaren *sF* für das Mineral Quarz, das die Mineralogie der sandigen Böden von Mullewa dominierte. Die Bodenspektren des solar-reflektiven Wellenlängenbereichs ließen kein eindeutiges korngrößenabhängiges spektrales Verhalten erkennen. Dies wurde mit dem starken Einfluss eisenhaltiger Minerale in Form von *coatings* erklärt.

Das *LWIR* dagegen bot für die Fragestellung der Arbeit sehr viel mehr spektrales Potential. So zeigte Quarz im *LWIR* diagnostische *sF* innerhalb der Reststrahlenbänder (*RB*) mit hohem spektralem Kontrast. Neben den *sF* von Quarz zeigten die Bodenspektren gleich mehrere *sF* von Tonmineralen. Kaolinit ließ innerhalb der *RB* mindestens vier distinktive *sF* erkennen: bei 9 μm , bei 9,8 μm , bei 10,5 μm und bei 10,95 μm . Für den *LWIR* konnte kein spektraler Einfluss der Eisenoxide/-hydroxide beobachtet werden. Die Bodenspektren des *LWIR* zeigten darüber hinaus ein diagnostisches spektrales Verhalten in Abhängigkeit von der Korngröße, welches sich einerseits in einer Reduktion des spektralen Kontrastes in den Reststrahlenbänder (*RB*) bei abnehmender Korngröße ausdrückte. Dabei blieben die Wellenlängenpositionen für die folgenden *sF* innerhalb der *RB* konstant: für die *sF* von Quarz bei 8,63 μm und bei 12,63 μm sowie für die *sF* von Kaolinit bei 9 μm und bei 9,8 μm . Andererseits wurde beobachtet, dass der Einfluss des Transparenz-Features mit abnehmender Korngröße als Folge der Volumenstreuung zunahm. Das Transparenz-Feature beeinflusste die spektrale Dynamik ab $\sim 9,8 \mu\text{m}$ und modifizierte die *sF* in diesem Wellenlängenbereich korngrößenabhängig. Der Effekt der Volumenstreuung war durch den Einfluss kleiner Korngrößen auch bei relativ hohen Gehalten an SOC zu erkennen und das unabhängig vom Tongehalt.

Der Vergleich der Spektren aus der thermalen Sensorik demonstrierte anhand der Quarz-Referenzsande die Übertragbarkeit der beiden verwendeten ε -FTIR-Spektrometer (μFTIR und MIDAC). Das Erhitzen der Proben vor den Messungen machte diese Methodik unempfindlich für Unterschiede in der Bodenfeuchte durch abweichende Adsorptionen aus der Luftfeuchte. Der Vergleich der ε -FTIR-Spektroskopie und der DHR-FTIR-Spektroskopie (keine Erhitzung) zeigte eine geringfügige Reduktion der Intensität der ε -Doppelbande von Quarz, welche sehr wahrscheinlich aus dem beschriebenen Adsorptions-Effekt resultierte. Der Vergleich mit Messungen im Freien verdeutlichte den Reduktions-Effekt durch den atmosphärischen Einfluss, der sich auf die Intensität der ε -Doppelbande konzentrierte. Doch auch hier zeigten die Spektren grundsätzlich große Übereinstimmung.

Für die Bodenspektren belegte der Vergleich zwischen den drei verwendeten thermalen Spektrometern die Konstanz der Wellenlängenpositionen der *sF*. Unterschiede zeigten sich dagegen in den Intensitäten der Spektren, die generell bei sandigen Bodenproben sehr gering ausfielen und sich mit zunehmendem Tongehalt etwas vergrößerten. Die Intensität der ε -Doppelbande von Quarz war aus den genannten Gründen für die DHR-FTIR-Spektroskopie immer am geringsten. Abweichungen darüber hinaus waren auf die naturgemäß inhomogene Materialzusammensetzung der Bodenproben zurückzuführen, welche zwangsläufig zu unterschiedlichen Probenoberflächen durch die Neuschüttungen führten. Die Unterschiede, die sich daraus ergaben, wurden jedoch als gering eingestuft.

Außerdem zeigten sich Abweichungen in den Bodenspektren, die sich aus den unterschiedlichen Prozessierungs-Methoden der ε -FTIR-Spektren ergaben. Die Unterschiede konzentrierten sich dabei auf die Bereiche der beiden Christiansen-Frequenz-Feature (*CFF*) und fielen für san-

dige, SiO₂-reiche Proben nur gering und für tonhaltige, SiO₂-arme Proben etwas größer aus. Die DHR-Spektren wurden im Bereich der *CFF* als der „Wahrheit“ am nächsten liegend verstanden, da sie aus Reflexions-Messungen hervorgingen. Grund für die Abweichungen zwischen den Bodenspektren aus der ε -FTIR-Spektroskopie waren die unterschiedlich definierten spektralen Bereiche in den Algorithmen der Temperatur-Emissivitäts-Trennung (*TES*), welche das Reflektanz-Minimum der Bodenspektren lokalisierten und dort $\varepsilon_{max} = 1.0$ festlegten. Daraus resultierte für die MIDAC-Spektren ausschließlich der Bereich um das erste *CFF* bei $\sim 7,5 \mu\text{m}$, für die μFTIR -Spektren dagegen – rauschbedingt – vorwiegend der Bereich um das zweite *CFF* bei $\sim 12,3 \mu\text{m}$.

Die Gegenüberstellung der Bodenspektren zeigte damit auch die Schwierigkeiten auf, mit denen die ε -FTIR-Spektroskopie und damit eine künftige thermale Fernerkundung beim Messen von Materialgemischen, wie sie für Böden charakteristisch sind, zwangsläufig konfrontiert wird. Für die untersuchten Bodenspektren zeigte sich diese Problematik mit der Abnahme des spektralen Einflusses von SiO₂ (abnehmender Sandgehalt und zunehmender Einfluss von Tonmineralen und/oder organischer Substanz). Dabei entfernte sich die im *TES*-Algorithmus getroffene Annahme ($\varepsilon_{max} = 1.0$), wegen der steigenden Reflektanzwerte an den *CFF*, sukzessive von ihrer Gültigkeit. Daraus begründen sich erweiterte Anforderungen an die Algorithmen der *TES*, die vor allem dann an Bedeutung gewinnen, wenn die Übertragbarkeit unterschiedlicher Sensoren im Vordergrund steht. Die Herausforderung liegt dann darin, ε_{max} individuell der „wahren“ Mineralogie der Böden anzunähern.

In den spektralen Signaturen des Quarz-Referenzsand *Merck*, die sich aus den Messungen der ε -FTIR-Spektroskopie ergaben, fiel gegenüber den DHR-FTIR-Spektren ein leichtes „Aufkippen“ ab $\sim 10 \mu\text{m}$ auf, welches als *tilt*- oder *ramp*-Effekt bezeichnet wurde. Mögliche Fehlerquellen diesbezüglich wurden in einer zu unpräzise abgeschätzten Proben-Temperatur aus der *TES* vermutet. Ein Versuch testete die Auswirkungen der Temperatur-Empfindlichkeit auf die Emissivitäts-Spektren. Diese wurden als Offset interpretiert und konnten die Ursache des beobachteten *tilt*- oder *ramp*-Effektes nicht endgültig klären. Außerdem wurde der Abkühlungs-Effekt während des Messvorganges anhand der MIDAC-Spektren untersucht. Dabei zeigte sich, dass für die in der Arbeit verwendeten Spektren, die über eine relativ lange Integrationszeit von 64 Scans (~ 15 Sekunden) gemittelt wurden, kein *tilt*- oder *ramp*-Effekt durch die Abkühlung während der Messung zu erkennen war. Ferner zeigte der Versuch, dass sich die Abkühlung der Proben in Abhängigkeit von ihrer Korngröße und/oder Materialzusammensetzung, als Folge der Unterschiede in den spezifischen Wärmekapazitäten, vollzog. Außerdem wurde die Funktionalität des verwendeten *TES*-Algorithmus bei dem Versuch bestätigt, da für die über alle 64 Scans gemittelten Radianz-Spektren in allen drei Fällen auch „gemittelte“ Temperaturen in der *TES* abgeschätzt wurden.

Kapitel 7

Ergebnisse der quantitativen Modellierung

Das Kapitel umfasst die quantitative Modellierung der Bodenparameter (Sand-, Ton- und SOC-Gehalt) mittels PLSR aus der thermalen Sensorik sowie der Vergleich mit der solar-reflektiven Sensorik unter Berücksichtigung unterschiedlicher spektraler Spezifikationen. Der Fokus lag hierbei auf dem Datensatz W-FARM, der sich auf Bodenproben beschränkt, die ausschließlich auf Ackerflächen genommen wurden. Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird im Folgenden nur ein Teil der Modelle aufgeführt. Tabelle 7.1 gibt einen Gesamtüberblick aller gerechneten Modelle, die vollständig im Anhang aufgeführt sind.

Spektrometer	Probensatz	Voll-Auflösung	Spektrales Resampling			
LWIR (μm)		7,9 - 12,3	TASI	HyspIRI	ASTER	HyMap
mFTIR	W-FARM	X*	X	X	X	
MIDAC	W-FARM	X*				
DHR	W-FARM	X				
VNIR-SWIR (μm)		0,45 - 2,5				
ASD	W-FARM	X				X

Tabelle 7.1: Überblick der gerechneten PLSR-Modelle für die Bodenparameter Sand-, Ton- und SOC-Gehalt für den LWIR und den VNIR-SWIR mit den jeweils untersuchten spektralen Spezifikationen im *Resampling*. Die Modelle sind im Anhang vollständig aufgeführt. Die *-markierten Modelle wurden zusätzlich mit dem Probensatz WEST gerechnet.

7.1 Quantifizierung der Bodenparameter mittels thermaler Sensorik

Im Folgenden werden die PLSR-Modelle zur Quantifizierung der drei Bodenparameter aus der thermalen Sensorik vorgestellt. Die Ergebnisse der unterschiedlichen thermalen Spektrometer werden dazu verglichen (μFTIR , MIDAC und DHR). Die Modellierung wurde für vier verschiedene spektrale Spezifikationen untersucht: mit der vollen spektralen Auflösung des jeweiligen Spektrometers (Voll-Auflösung) sowie mit dem spektralen *Resampling* auf TASI-600, HyspIRI und ASTER. In Abbildung 7.1 sind die spektralen Dimensionen dargestellt, wie sie in die Modellierung eingingen.

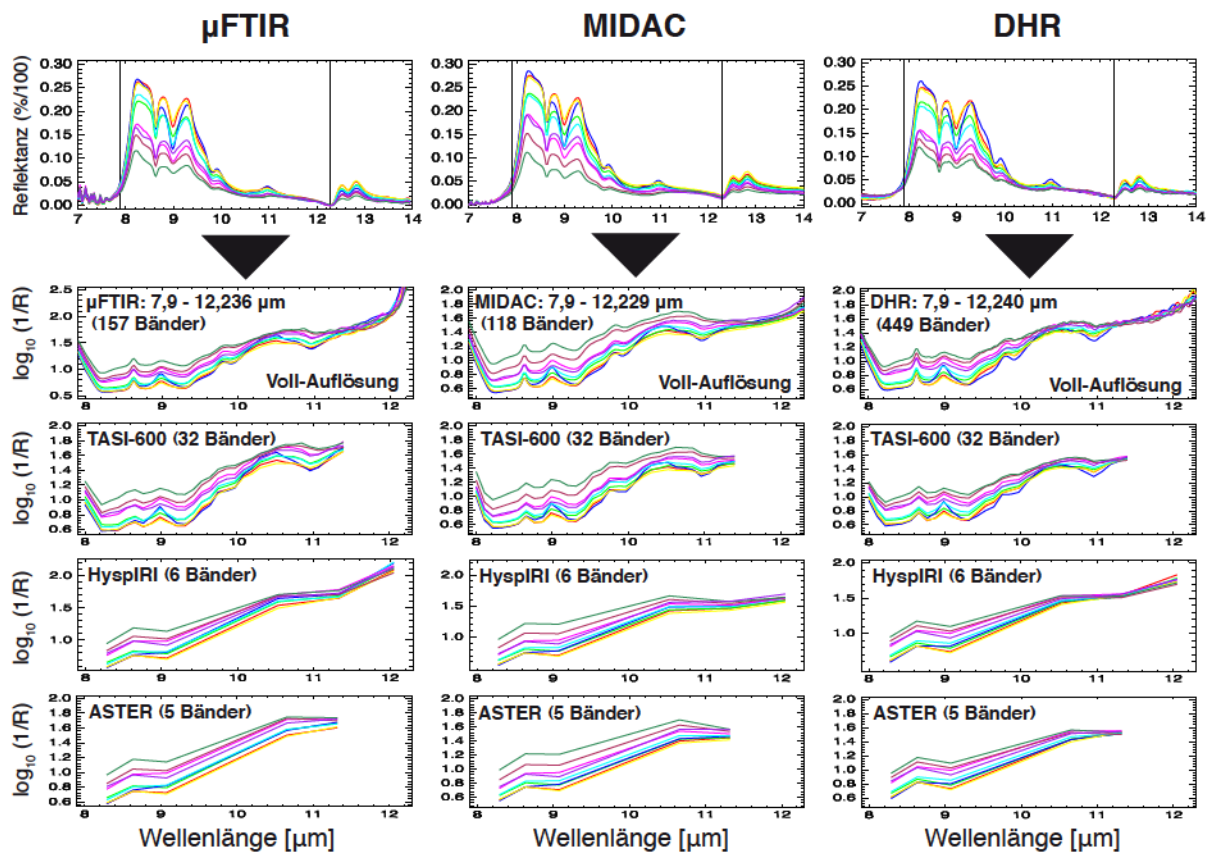


Abbildung 7.1: Spektrale Dimensionen der thermalen Sensorik, wie sie aus den Original-Spektren hervorgingen und in die PLSR-Modellierung eingingen (Voll-Auflösung, TASI-600, HypsIRI und ASTER).

7.1.1 Voll-Auflösung (μ FTIR, MIDAC und DHR)

Für die quantitative Modellierung aus der Voll-Auflösung wurde ein gemeinsamer Wellenlängenbereich zwischen 7,9 und 12,3 μm definiert, der für alle thermalen Spektrometer zur Verfügung stand und größere Rauscheinflüsse ausschloss (vgl. Abb. 7.1).

Quantifizierung des Sandgehaltes

Der überwiegend stark sandige Charakter der Böden im Untersuchungsgebiet Mullewa, mit nur vereinzelt auftauchenden stark tonreichen Proben, führte zu der beschriebenen asymmetrischen Verteilung der Texturwerte (vgl. Kap. 5). Die Ergebnisse der PLSR-Modelle für die vollständigen Probensätze (W-FARM-ALL und WEST-ALL) suggerierten dabei adäquate Vorhersagemodelle durch hohe R^2 -Werte (vgl. Abb. 7.2). Da sich diese hier auf unterschiedlich große Wertebereiche des Sandgehaltes (y-Bereiche) beziehen, dürfen sie jedoch nicht zur Beurteilung der Güte der Regressionen verwendet werden (bei gleichem RMSE, aber größerem y-Bereich, wird R^2 ungerechtfertigt größer). Die Schwäche dieser Modellierung über größere Datenlücken hinweg zeigte sich dabei vielmehr in den relativ hohen mittleren Vorhersagefehlern ($\text{RMSE}(\text{X-VAL})$).

Vor diesem Hintergrund wurden einzelne Modelle erzeugt, die auf schrittweise in Richtung der Hauptverteilung ihrer Texturwerte beschnittenen Datensätzen basierten. Für den Probensatz W-FARM, der im Folgenden im Fokus stehen soll, folgten daraus drei separate PLSR-Modelle: W-FARM-ALL (der vollständige Probensatz), sowie zwei reduzierte Probensätze, $>80\%$ und $>85\%$ Sandgehalt. Etwaige Ausreißer, die in einem der höheren Modelle identifiziert wurden, übertrugen sich automatisch auf das darunterliegende.

In Abbildung 7.2 sind alle PLSR-Modelle, die sich aus dieser Vorgehensweise ergaben, für die μ FTIR-Spektren und den Sandgehalt beider Datensätze (W-FARM und WEST) dargestellt. Die Abbildung zeigt den beschriebenen Effekt am deutlichsten für den Datensatz WEST, wo extrem hohe R^2 -Werte die hohe Modell-Güte in den stark asymmetrisch verteilten Daten suggerieren – mit Annäherung an die Hauptverteilung des Sandgehaltes aber abnehmen. Die stark asymmetrischen Modelle ergaben dabei aufgrund des großen y-Bereichs „bessere“ R^2 -Werte, obwohl der RMSE sogar viel größer war. Das Modell über den gesamten y-Bereich mit einem ~ 4 mal größeren $\text{RMSE}(\text{X-VAL})$ ist damit auch ~ 4 mal schlechter als das Modell über den reduzierten y-Bereich einzustufen. Mit Annäherung an die Hauptverteilung nahm auch der Einfluss der Ausreißer stetig zu, weshalb sie in den reduzierten Probensätzen teilweise entfernt wurden. Der mittlere Vorhersagefehler näherte sich in den Modelle beider Probensätze ($>85\%$ Sandgehalt) ungefähr 1% an. Mit dem Modell des Datensatzes WEST konnte der Sandgehalt mit einem $\text{RMSE}(\text{X-VAL})$ von $1,28\%$ ($R^2 = 0,72$) vorhergesagt werden, mit dem Datensatz W-FARM mit einem $\text{RMSE}(\text{X-VAL})$ von $1,09\%$ ($R^2 = 0,84$). Das bessere Ergebnis zugunsten des Datensatzes W-FARM ist dabei hauptsächlich auf die Mittelung der Spektren und der Sandwerte aus den detailliert beprobten Plots zurückzuführen.

Im Weiteren wird auf diese ausführliche Interpretation der Ergebnisse verzichtet. Der Fokus soll vielmehr auf dem Probensatz W-FARM mit Sandgehalten $>85\%$ liegen (vgl. grün umrandetes Modell aus Abb. 7.2), der für die Verhältnisse im Untersuchungsgebiet Mullewa am repräsentativsten ist und daher die Anwendbarkeit der vorgestellten Methode demonstrieren soll. Er dient ferner als Vergleichs-Probensatz Sand (vgl. Tab. 5.1), um bei der Gegenüberstellung der *Resampling*-Ergebnisse sowie dem Vergleich mit der Modellierung auf Grundlage der solar-reflektiven Messungen einen identischen y-Bereich garantieren zu können. Für den

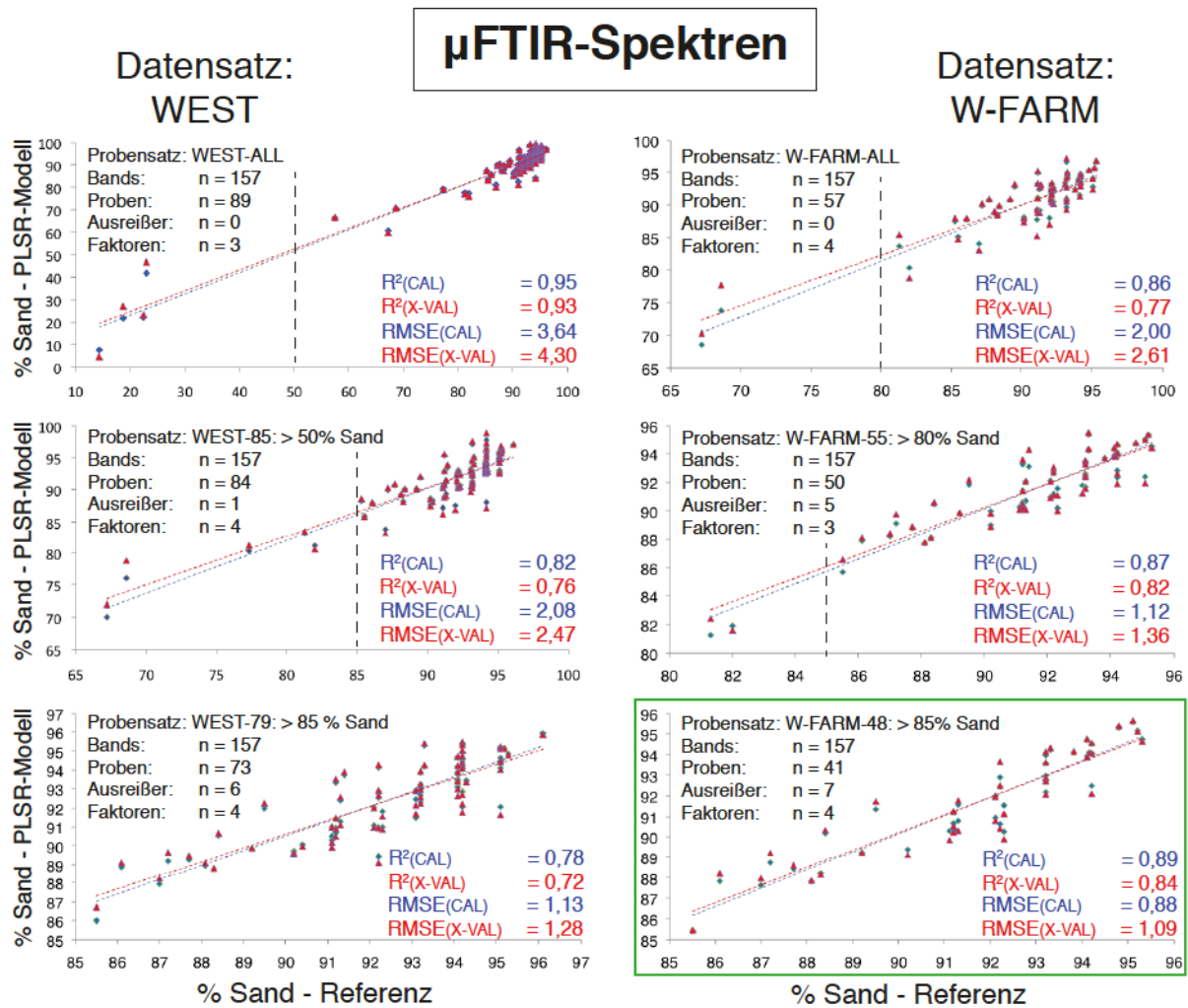


Abbildung 7.2: Ausführliche Darstellung der PLSR-Ergebnisse des Sandgehaltes (Vorhersage- versus Referenzwerte) mit den μ FTIR-Spektren in der Voll-Auflösung für beide Datensätze, WEST und W-FARM (in blau: Kalibrierung, in rot: Kreuz-Validierung). In je drei Schritten wurden die Probensätze in Richtung der Hauptverteilung der Werte beschnitten (gestrichelte Linien). Grün markiert ist der Vergleichs-Probensatz Sand, der für die weitere Interpretation im Fokus steht.

Bodenparameter Tongehalt wurde entsprechend der Wertebereich schrittweise auf <15 % reduziert und der dazugehörige Vergleichs-Probensatz Ton definiert (s.u.). Innerhalb der Vergleichs-Probensätze, in denen der y-Bereich konstant ist, können die R^2 -Werte wieder zur Beurteilung der Modell-Güte herangezogen werden.

In Abbildung 7.3 sind die entsprechenden Ergebnisse der PLSR-Modelle für alle drei verwendeten thermalen Spektrometer in Voll-Auflösung dargestellt. Das Modell aus den μ FTIR-Spektren entspricht dabei dem Vergleichs-Probensatz und stimmt mit dem grün markierten aus Abbildung 7.2 überein. Die Ergebnisse der drei Modelle sind sich in puncto Vorhersagegenauigkeit sehr ähnlich. Aus den MIDAC-Spektren konnte der Sandgehalt mit einem RMSE(X-VAL) von 0,97 % ($R^2 = 0,85$) und aus den DHR-Spektren mit einem RMSE(X-VAL) von 0,92 % ($R^2 = 0,88$) vorhergesagt werden. Mit dem deutlich umfangreicheren X-Datenraum konnte das DHR-Modell etwas mehr Varianz im y-Datenraum erklären als das MIDAC-Modell oder das μ FTIR-Modell. Beide hätten durch zusätzliche Faktoren keine merkliche Verbesserung erzielt.

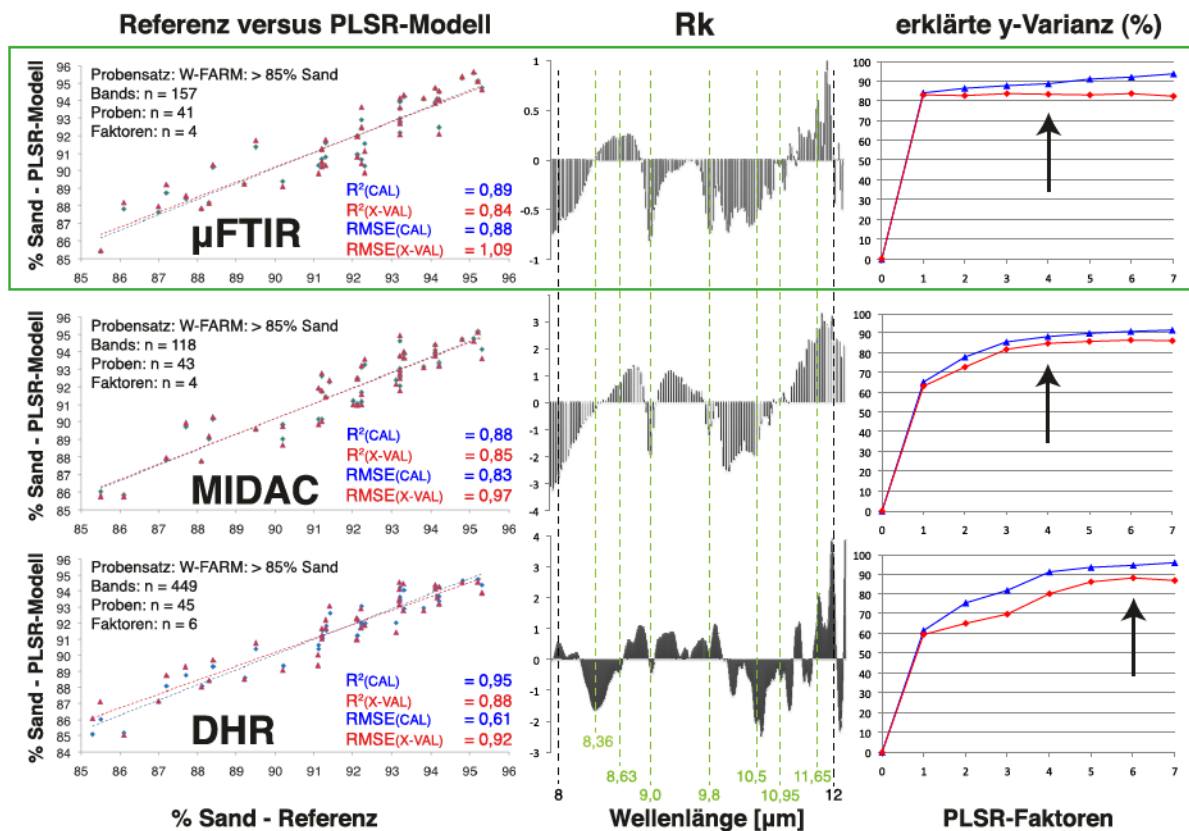


Abbildung 7.3: Ergebnisse der PLSR-Modellierung (Vorhersage, Regressionskoeffizienten (Rk) und erklärte y-Varianz) für den Sandgehalt (>85 % Sand) mittels thermaler Sensorik (μ FTIR, MIDAC und DHR). Grün gestrichelt markiert sind die Positionen der beschriebenen sF aus Abb. 6.2 u. 6.10. Grün umrandet ist der Vergleichs-Probensatz Sand.

Wegen der geringen Unterschiede der RMSE- und R^2 -Werte soll an dieser Stelle keine Präferenz für eines der Modelle abgeleitet werden. Auch vor dem Hintergrund, dass die Probenzahl in den drei Modellen nicht exakt übereinstimmte. Geringfügige Unterschiede bei der Bestimmung von Ausreißern im X-Datenraum konnten beispielsweise aus stark abweichenden spektralen Signaturen aus der Spektroskopie rühren (mögliche Ursachen: Homogenisierung und Schüttung der Proben, Sortierungseffekte oder verstärkter Rauscheinfluss bei SiO_2 -armen Bodenproben).

Die spektrale Interpretation anhand der Regressionskoeffizienten (Rk) offenbarte die dominierenden spektralen Einflüssen, die den Vorhersagemodellen zugrunde lagen (vgl. Kap. 4.3.2). Bei der Quantifizierung des Sandgehaltes aus der thermalen Sensorik (Voll-Auflösung) zeigten sich die sF schlüssiger Bodenparameter prägnant im Verlauf der Rk . Die Einflüsse der im Kapitel 6 beschriebenen sF auf die Rk der Modelle sind in Abbildung 7.3 grün markiert. Sie stehen im Einklang mit den sF aus den Abbildungen 6.2 u. 6.10. Auf dieser Grundlage konnten die spektralen *Driver* sD Quarz, Kaolinit und Korngröße identifiziert werden, die in einem direkten Zusammenhang mit dem Bodenparameter Sandgehalt stehen und dessen Modelle daher als opto-physikalisch fundiert bezeichnet werden. Im Folgenden sollen die wesentlichen Punkte dieser spektralen Einflüsse auf die Modelle diskutiert werden:

- 1.) **Reduktion der RB mit abnehmender Korngröße:** Alle drei Modelle zeigen den Einfluss der ε -Doppelbande von Quarz. Dabei ist für die beiden ε -FTIR-Spektrometer (μ FTIR und MIDAC) ein treppenartig abnehmender Einfluss dieser Bande zu erkennen, der den Anstieg der Reflektanz im ersten Quarzflügel repräsentiert. Das Muster spiegelt die Abhängigkeit des spektralen Kontrastes in den RB von der Korngröße wider (vgl. Kap. 2.3.2). Auf dem Plateau des ersten Quarzflügels verliert sich der Einfluss bis zu einem prägnanten Merkmal bei $8,36 \mu\text{m}$ und steigt dann wieder an. Dieses spektrale Merkmal ist auch in den Spektren zu erkennen, konnte aber bisher keinem pedologischen oder geologischen sF zugeordnet werden (vgl. Abb. 6.2). Im DHR-Modell trug das spektrale Merkmal bei $8,36 \mu\text{m}$ entscheidend zur Vorhersage des Sandgehaltes bei. Die für das Modell relevanten Wellenlängen konzentrieren sich auf das Plateau des Quarzflügels selbst (kurzwellig begrenzt durch das Reflektanz-Maximum bei $8,2 \mu\text{m}$ und langwellig durch das Quarz-Feature bei $8,63 \mu\text{m}$). Dem Anstieg der Reflektanz im ersten Quarzflügel fällt dagegen vergleichsweise wenig Gewicht zu.
- 2.) **Kaolinit-Feature:** Der Einfluss des Kaolinit-Features bei $9,0 \mu\text{m}$ tritt in allen drei Modellen prägnant in Erscheinung. Im MIDAC- und v.a. im DHR-Modell waren dabei die Absorptionsschultern des sF von zentraler Bedeutung. Alle drei Modelle zeigen außerdem die Relevanz des Kaolinit-Feature bei $9,8 \mu\text{m}$ und bei $10,95 \mu\text{m}$ für ihre Vorhersagemodelle.
- 3.) **Einfluss der Volumenstreuung:** Auffallend ist die große Bedeutung der Wellenlängen $>9,8 \mu\text{m}$, die unter dem Einfluss des Transparenz-Features diesen Bereich korngrößenabhängig prägen (vgl. Kap. 6.4, Pkt. 4: Einfluss des Transparenz-Features als Folge der Volumenstreuung). Besonders eindrucksvoll ist dieser Effekt am μ FTIR- und am MIDAC-Modell zu sehen, wo sich ausgehend vom sF bei $10,95 \mu\text{m}$ dieser Einfluss in kurz- und langwelliger Richtung ausbreitet. Die beobachtete Modell-Relevanz spiegelt die spektrale Dynamik in diesem Bereich durch den Einfluss der Korngröße wider (vgl. Abb. 6.10a1). Das DHR-Modell signalisiert in diesem Zusammenhang deutlich seine Präferenz für den spektralen Bereich um das Reflektanz-Minimum von Kaolinit bei $\sim 10,5 \mu\text{m}$ sowie den Reflektanz-Abfall hin zum zweiten CFF bei $12,3 \mu\text{m}$.
- 4.) **DHR-Modell:** Durch die höhere Bandzahl (Ursache hierfür ist das kleinere *Sampling Interval* - die spektrale Auflösung war beim DHR wie beim MIDAC gleich groß: 4 cm^{-1}) löst das DHR-Modell auch die Rk feiner auf, wobei die sF genauer abgebildet werden. Das höhere Rauschen in den DHR-Spektren ab $\sim 10 \mu\text{m}$ (v.a. bei SiO_2 -armen Bodenproben, vgl. Abb. 7.4) übertrug sich jedoch auch auf die Rk , welche sich deshalb im DHR-Modell weniger anschaulich interpretieren lassen. Durch zusätzliches Glätten der Spektren konnte die Interpretation verbessert werden (nicht abgebildet). Die Vorhersagegenauigkeit veränderte sich dadurch nur geringfügig.

5.) Entwicklung der erklärten y-Varianz: Ein weiteres Maß für die Stabilität bzw. Robustheit eines PLSR-Modells ist die Entwicklung der erklärten y-Varianz über die wachsende Faktorenzahl. Im optimalen Fall entwickelt sie sich in der Kalibrierung gleichmäßig mit der Validierung und die Unterschiede sind minimal. Vor diesem Hintergrund schnitt das MIDAC-Modell in puncto Stabilität am besten ab, obwohl alle drei Modelle diesbezüglich als stabil bzw. robust bezeichnet werden können.

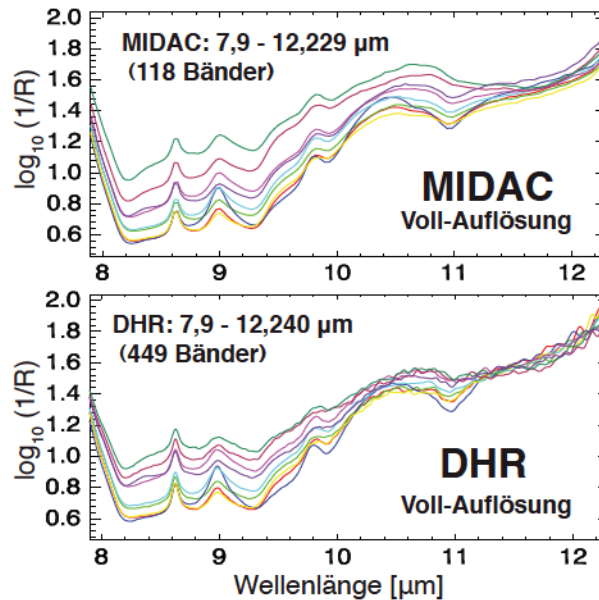


Abbildung 7.4: Erhöhter Rauschanteil in den DHR-Spektren ab $\sim 10 \mu\text{m}$ im Vergleich zu den MIDAC-Spektren (vergrößert aus Abb. 7.1.)

Quantifizierung des Tongehaltes

Die PLSR-Modelle zur Quantifizierung des Tongehaltes (Hauptverteilungsbereich $< 15 \%$ Ton) aus der thermalen Sensorik (Voll-Auflösung) sind in Abbildung 7.5 zusammengefasst. In allen drei Modellen ließ sich der Tongehalt mit einer ähnlichen Genauigkeit vorhersagen: $\text{RMSE}(\text{X-VAL}) = 1,0 \%$ für μFTIR , $= 0,96 \%$ für MIDAC und $= 1,05 \%$ für DHR. Für die Vorhersage aus der $\varepsilon\text{-FTIR}$ -Spektroskopie wurde jeweils ein 3-faktoriges Modell gewählt. Das μFTIR -Modell konnte damit 76,8 % der y-Varianz erklären, das MIDAC-Modell 72,6 %. Im Falle des DHR-Modells wurde 4 Faktoren gewählt, womit 76,1 % der y-Varianz im Modell erklärt werden konnten. Auf zusätzliche Faktoren, welche die y-Varianz noch geringfügig erhöht hätten, wurden wegen mangelnder relevanter spektraler Information in den entsprechenden *W-loadings* verzichtet.

Der Einfluss der *sF* von Kaolinit und Quarz sowie die korngößenabhängigen *sF* zeichnen sich wie bei den Sand-Modellen auch hier als *sD* in den *Rk* ab (vgl. Abb. 7.5), womit auch hier die opto-physikalische Grundlage gegeben ist. Die inverse Beziehung zwischen dem Sand- und Tongehalt, der in den *W-loadings* deutlich erkennbar ist (s.u.), pauste sich für die meisten *sD* bis in die *Rk* durch (vgl. dazu auch die Vorzeichenwechsel aus Abb. 7.9).

Auch für die Ton-Modelle ist die starke korngößenabhängige Wirkung auf den Anstieg der Reflektanz im ersten Quarzflügel zu beobachten (vgl. Pkt. 1 des Sand-Modells). Das spektrale

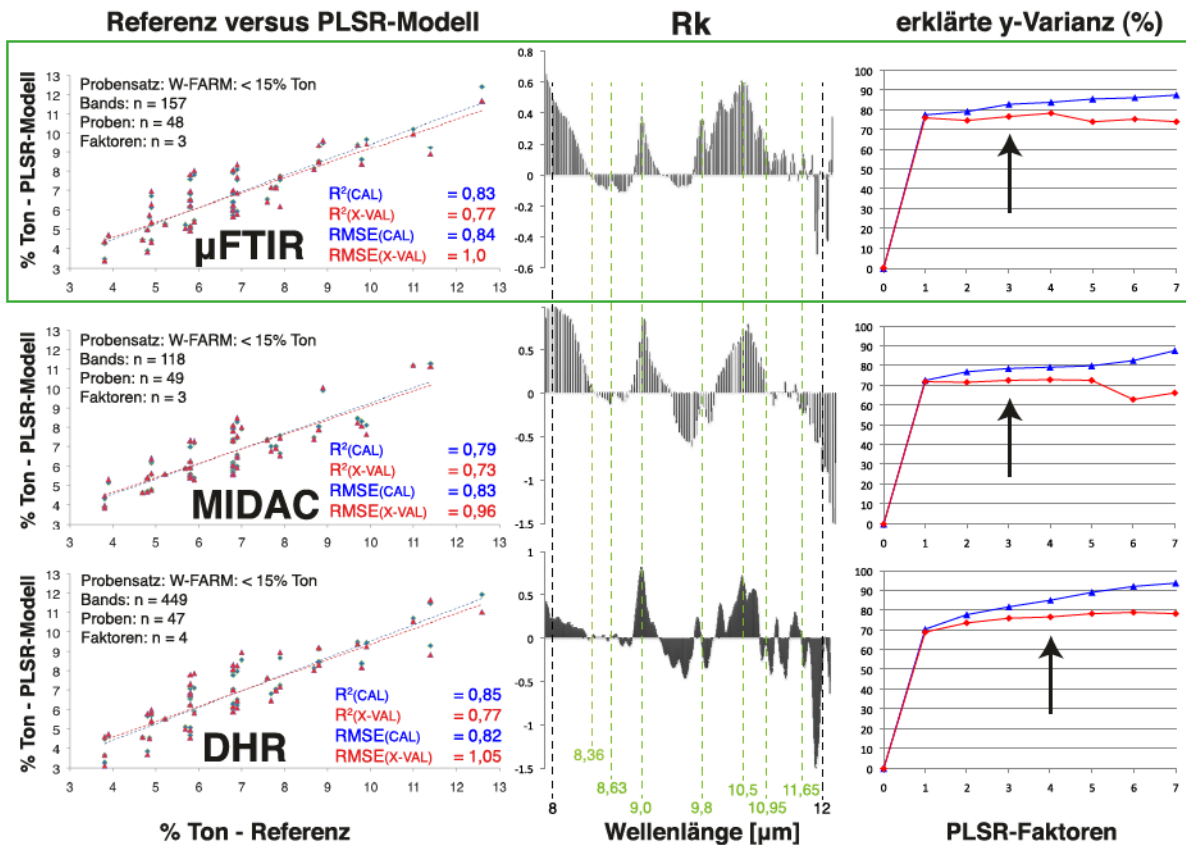


Abbildung 7.5: Ergebnisse der PLSR-Modellierung (Vorhersage, Regressionskoeffizienten (Rk) und erklärte y-Varianz) für den Tongehalt (<15 % Ton) mittels thermaler Sensorik (μFTIR, MIDAC und DHR). Grün gestrichelt markiert sind die Positionen der beschriebenen sF aus Abb. 6.2 u. 6.10. Grün umrandet ist der Vergleichs-Probensatz Ton.

Merkmal bei $8,36 \mu\text{m}$ ist zu erkennen, das Plateau des ersten Quarzflügels zeigt aber in keinem der Modelle Relevanz.

Das DHR-Modell legt viel Gewicht auf den Reflektanz-Abfall hin zum zweiten *CFF* bei $12,3 \mu\text{m}$, der auch im MIDAC-Modell eine bedeutende Rolle gespielt hat. Im μFTIR -Modell ist dieser Bereich weniger prägnant ausgebildet. Dies erinnert an die beschriebenen spektralen Unterschiede, die sich aus den *TES*-Algorithmen ergaben (vgl. Pkt. 1 aus Kap. 6.3.3). Für die μFTIR -Spektren, die fast ausschließlich am zweiten *CFF* „eingehängt“ wurden (vgl. Abb. 6.6), könnte dieser Bereich auf Grund der künstlichen Verzerrung an Modell-Relevanz verloren haben.

Wieder zeigt sich das Kaolinit-*Feature* bei $9,0 \mu\text{m}$ in allen Modellen als dominanter spektraler Einfluss (vgl. Pkt. 2 im Sand-Modell), mit dem Unterschied, dass in den Ton-Modellen die Absorptionsschultern des *sF* weniger von Bedeutung waren und die absoluten Absorptionstiefen im Vordergrund standen. Auch der Einfluss des Transparenz-*Features* zeichnete sich für die Ton-Modelle in den *Rk* deutlich ab. Für die Ton-Modelle stand dabei der spektrale Bereich zwischen den beiden Kaolinit-*Feature* bei $9,8 \mu\text{m}$ und $10,95 \mu\text{m}$ im Mittelpunkt. Dabei gipfelten die *Rk* in allen drei Modelle an dem beschriebenen *sF* bei $10,5 \mu\text{m}$.

Auch für die Ton-Modelle fällt auf, dass das *Rk*-Muster des DHR-Modells wegen der hohen Bandzahl spektral feiner aufgelöst ist (vgl. Pkt. 4 im Sand-Modell). Der erhöhte Rauschanteil in den DHR-Spektren ab $\sim 10 \mu\text{m}$ erschwerte die Interpretation dieses Bereichs, ohne dass die Vorhersagegenauigkeit davon merklich beeinflusst wurde. Durch zusätzliches Glätten der Spektren konnte die Interpretation verbessert werden (nicht abgebildet). Die Vorhersagegenauigkeit veränderte sich dabei nur geringfügig.

Quantifizierung des SOC-Gehaltes

Abbildung 7.6 veranschaulicht die Ergebnisse der PLSR-Modellierung zur Quantifizierung des SOC-Gehaltes mittels der thermalen Sensorik (Voll-Auflösung). Das μFTIR - und das MIDAC-Modell konnten den SOC-Gehalt bei 6 Faktoren mit einem RMSE(X-VAL) von 0,1 % und das DHR-Modell mit einem RMSE(X-VAL) von 0,12 % bei 5 Faktoren vorhersagen. Wegen der relativ ungleichmäßigen Entwicklung der y-Varianzen mit zunehmender Faktorenzahl waren für die Vorhersage des SOC-Gehaltes mehr Faktoren (~ 2 Faktoren) nötig als für die Vorhersage der beiden Textur-Parameter (Sand- und Tongehalt), um das jeweils stabilste Modell aufzubauen. Aufgrund der erhöhten Faktorenanzahl wurden die SOC-Modelle als vergleichsweise „kompliziert“ bewertet. Bezüglich der relativ großen Unterschiede in den erklärten y-Varianzen zwischen der Kalibrierung und der Validierung wurden die SOC-Modelle zudem als weniger stabil bzw. robust beurteilt als die der Textur-Parameter. Vor diesem Hintergrund schnitt das MIDAC-Modell am besten ab. Es erklärte mit 77,81 % auch den größten Anteil der y-Varianz (μFTIR -Modell: 73,23 % und DHR-Modell: 69,94 %).

In der spektralen Interpretation der SOC-Modelle, auf Grundlage der *Rk*, fiel besonders die relativ geringe Relevanz des Spektralbereichs $> 9,8 \mu\text{m}$ auf, der den Einfluss des Transparenz-*Features* signalisiert, und in den Modellen der Textur-Parameter eine sehr große Bedeutung hatte. Die sensible Wirkung des SOC-Gehaltes auf das Transparenz-*Feature*, welche in Kapitel 6 in den *LWIR*-Spektren beobachtet wurde (vgl. Abb. 6.11), zeigte sich in den SOC-Modellen durch erhöhte *Rk* an dem Kaolinit-*Feature* selbst, bei $\sim 10,95 \mu\text{m}$. Durchgängig hohe *Rk*, wie sie sich in den Modellen der Textur-Parameter für die Wellenlängen vor und nach diesem Kaolinit-*Feature* offenbarten, konnten für die SOC-Modelle aber nicht beobachtet werden. Das Kaolinit-*Feature*

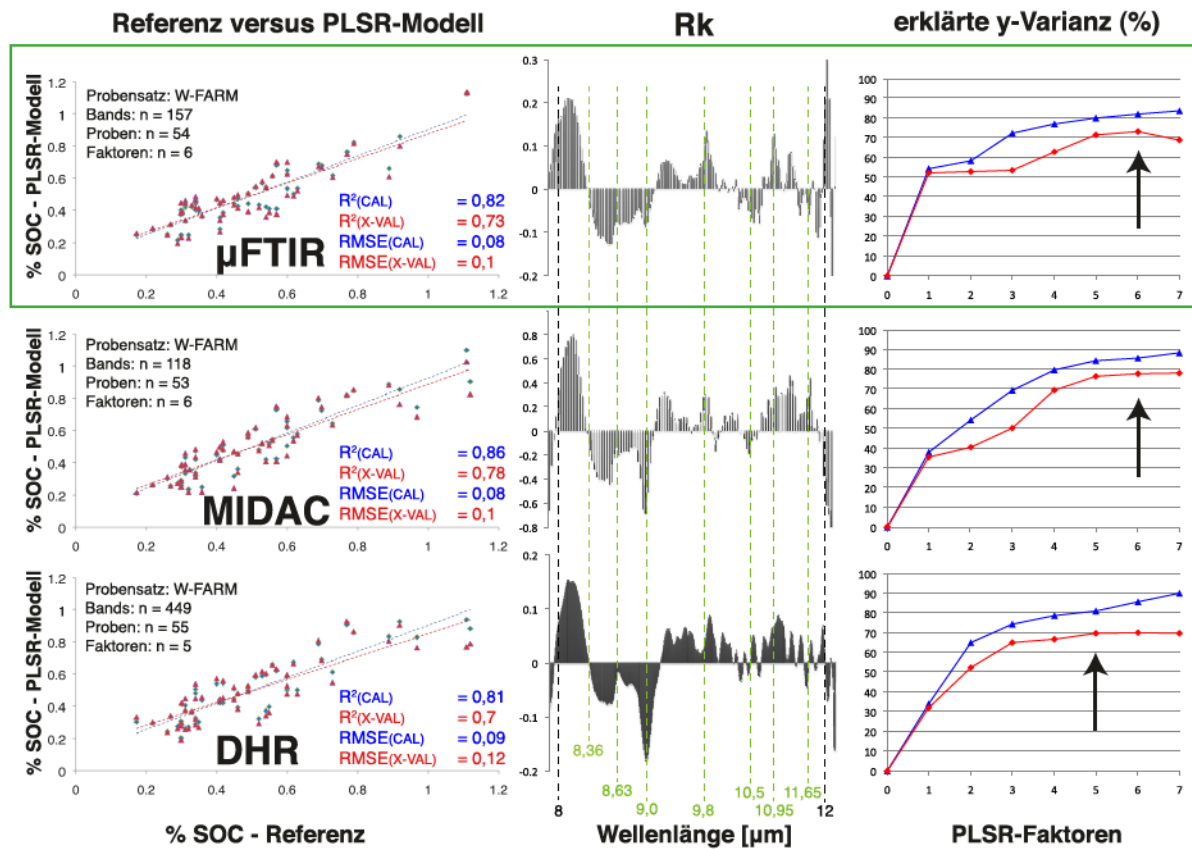


Abbildung 7.6: Ergebnisse der PLSR-Modellierung (Vorhersage, Regressionskoeffizienten (R_k) und erklärte y-Varianz) für den SOC-Gehalt mittels thermaler Sensorik (μFTIR , MIDAC und DHR). Grün gestrichelt markiert sind die Positionen der beschriebenen sF aus Abb. 6.2 u. 6.10. Grün umrandet ist der Vergleichs-Probensatz SOC.

bei $\sim 9,8 \mu\text{m}$, das sich am Rand des Wirkungsbereichs der Volumenstreuung befindet, wies in allen SOC-Modellen einen markanten Peak in den *Rk* auf.

Der dominierende spektrale Einfluss auf die SOC-Modelle konzentrierte sich jedoch auf den Bereich der ε -Doppelbande von Quarz bzw. der ε -Tripelbande, die sich aus dem zusätzlichen *sF* von Kaolinit bei $9,0 \mu\text{m}$ ergibt. Diesem Kaolinit-*Feature* wurde in allen Modellen eine große Relevanz beigemessen. Der einflussreichste und über alle drei Modelle konstanteste spektrale Einfluss war der Bereich des ersten Quarzflügels bis $8,63 \mu\text{m}$, der wie in den Sand-Modellen von dem spektralen Merkmal bei $8,36 \mu\text{m}$ durchtrennt wurde.

Die aus der Literatur bekannten *sF* organischer Verbindungen im *LWIR* lassen viel Raum für weitere Interpretationen der *Rk* (vgl. Tab. 2.1). In diesem Zusammenhang könnten die spektralen Einflüsse von Karbonsäuren, aliphatischen Verbindungen, Polysacchariden oder Zellulose eine Rolle gespielt haben. Der indirekte Einfluss über die Mineral-*Feature* in den Modellen war aber weitaus dominanter.

Auf der Grundlage dieser Interpretation ergaben sich für die SOC-Modelle die *sD* Kaolinit und Quarz. Verglichen mit den Modellen der Textur-Parameter war der *sD* Korngröße in den SOC-Modellen nur eingeschränkt wirksam, da der Einfluss des Transparenz-*Features* fehlte. Die den Modellen zugrunde liegenden spektralen Einflüsse stimmten darin überwiegend mit denen der Textur-Parameter überein (vgl. Sand- und Ton-Modelle). Wegen der unzureichenden direkten Zusammenhänge mit dem Bodenparameter SOC-Gehalt, wurden diese Modelle als nicht optophysikalisch fundiert bezeichnet. Daraus erklären sich auch die relativ „komplizierten“ und weniger robusten SOC-Modelle (im Vergleich zu den Modellen der Textur-Parameter), die auf den überwiegend indirekten Abhängigkeiten zu den spektralen Eigenschaften der Minerale Quarz und Kaolinit beruhten. Der indirekte Einfluss dieser Mineral-*Features* in den SOC-Modellen führte sehr wahrscheinlich zu der erhöhten Anzahl an benötigten PLSR-Faktoren.

7.1.2 Spektrales *Resampling*: TASI (32), HypsIRI (6) und ASTER (5)

Die Ergebnisse zur quantitative Modellierung auf Grundlage des spektralen *Resamplings* umfassen für den Bereich des thermalen Infrarots die spektralen Spezifikationen des flugzeuggetragenen Sensors TASI-600 mit 32 Bändern sowie die der zwei multispektralen Satelliten-Sensoren HypsIRI mit 6 Bändern und ASTER mit 5 Bändern (vgl. Kap. 4.2). Die folgenden Ergebnisse beschränken sich dabei auf das *Resampling* der μFTIR -Spektren. Abbildung 7.7 fasst die Vorhersageergebnisse der PLSR-Modelle zusammen. Den Modellen liegen wiederum die Vergleichs-Probensätze für den Sand-, den Ton- und den SOC-Gehalt zugrunde. Sie entsprechen damit denen der bereits vorgestellten μFTIR -Modelle der Voll-Auflösung (vgl. Kap. 7.1.1) und sind für alle spektralen Spezifikationen identisch. Die Entwicklung der y-Varianzen über die Faktoren sowie die *Rk* sind in den Abbildungen 7.8 bzw. 7.9 dargestellt. Zum Vergleich wurden die Abbildungen um die bereits vorgestellten Ergebnisse aus den Modellen der Voll-Auflösung ergänzt.

Textur-Parameter: Sand- und Tongehalt

Mit abnehmender spektraler Dimensionalität war sowohl für den Sand- als auch für den Tongehalt eine Vorhersage bis zur spektralen Spezifikation von ASTER (5 Bänder) mit sehr stabilen PLSR-Modellen möglich. Dabei veränderten sich die RMSE-Werte sowie die erklärten

y-Varianzen kaum (vgl. Abb. 7.7). Die Vorhersage des Sandgehaltes konnte sogar von der Voll-Auflösung mit 157 Bändern ($\text{RMSE(X-VAL)} = 1.09\%$ und erklärte y-Varianz = 83,5 %) bis hin zur ASTER-Auflösung mit nur 5 Bändern ($\text{RMSE(X-VAL)} = 1.03\%$ und erklärte y-Varianz = 85,3 %) geringfügig verbessert werden. Das beste Ergebnis konnte sowohl für den Sand- ($\text{RMSE(X-VAL)} = 1.02\%$ und erklärte y-Varianz = 85,5 %) als auch für den Tongehalt ($\text{RMSE(X-VAL)} = 0.96\%$ und erklärte y-Varianz = 78,5 %) mit den 32 spektralen Bändern des TASI-Sensors erzielt werden. Die geringen Unterschiede sowie die gleichmäßige Entwicklung der erklärten y-Varianzen über die Faktorenzahl zwischen Kalibrierung und Validierung (vgl. Abb. 7.8) belegen die Robustheit dieser Modelle.

Der Grund für die überzeugend gute Performanz der ASTER-Modelle mit nur 5 spektralen Bändern für den Sand- und den Tongehalt liegt zum einen im reduzierten X-Datenraum selbst, der durch seine geringere Dimensionalität auch einfacher zu modellieren war. Dazu musste der reduzierte X-Datenraum aber auch alle relevanten spektralen Informationen abdecken. Abbildung 7.9 bestätigt dies anhand der R_k aus den Modellen der unterschiedlichen spektralen Spezifikationen. Dabei wird deutlich, dass die wichtigsten Merkmale der sD , die für die Voll-Auflösung bereits identifiziert und als opto-physikalisch fundiert bewertet wurden (vgl. Kap. 7.1.1), bis zur ASTER-Auflösung mit nur 5 Bändern erhalten blieben. Oder mit anderen Worten: Die ASTER-Bänder liegen für die Vorhersage des Sand- und Tongehaltes an den dafür entscheidenden Wellenlängenpositionen. Bei der Vorhersage aus der Voll-Auflösung mussten zwangsläufig weitere nicht relevante spektrale Informationen in den Modellen mit berücksichtigt werden. Trotzdem zeigt die geringe Faktorenzahl dieser Modelle, dass die PLSR in der Lage war, den hyperspektralen X-Datenraum auf die wenigen entscheidenden spektralen Informationen (Faktoren) hin zu reduzieren. Die R_k der ASTER-Modelle signalisierten die Bedeutung der Bänder 13 und 14 für die Vorhersage der Textur-Parameter, welche sich aus der spektralen Dynamik im Einflussbereich des Transparenz-Features ergab (vgl. Abb. 6.10).

Der zusätzliche HypsIRI-Kanal (Band 8) verbesserte die Vorhersage des Tongehaltes nur geringfügig gegenüber der ASTER-Auflösung. Die Vorhersage des Sandgehaltes verschlechterte sich dabei sogar leicht. Die Nähe des HypsIRI-Kanals zum zweiten CFF bei $12,3\ \mu\text{m}$ und die damit verbundene spektrale Unsicherheit, die sich aus dem TES -Algorithmen (vgl. Pkt. 1 aus Kap. 6.3.3) ergab, könnte dabei eine Rolle gespielt haben.

Zum Vergleich soll an dieser Stelle noch der aus der Literatur bekannte Korngrößen-Index nach Salisbury und D’Aria (1992b) herangezogen werden, der sich aus dem Band-Ratio der ASTER-Bänder 10 und 14 berechnet (vgl. Abb. 7.10, hier in normalisierter Form). Für die Tongehalte des Vergleichs-Probensatzes konnte kein überzeugender Zusammenhang gezeigt werden ($R^2 = 0,36$). Die Summe aus Ton- und Schluffgehalt – als $\%$ -fines in Salisbury und D’Aria (1992b) verwendet – machte keinen merklichen Unterschied auf das Ergebnis. Vor dem Hintergrund der spektralen Dynamik im Einflussbereich des Transparenz-Features sollte generell darauf verzichtet werden die ASTER-Bänder 14 oder 13 (taucht beispielsweise im SiO_2 -Index (13/10) in Cudahy (2012) auf) als eine konstante Bezugsgröße zu sehen.

SOC-Gehalt

Mit abnehmender spektraler Dimensionalität wurden die Unterschiede zwischen den PLSR-Modellen zur Vorhersage der beiden Textur-Parameter (Sand- und Tongehalt) und denen zur Vorhersage des SOC-Gehaltes deutlich. Während sich die Reduktion der spektralen Bänder auf die Vorhersage der Textur-Parameter kaum oder sogar positiv auswirkte, litt die Performanz der

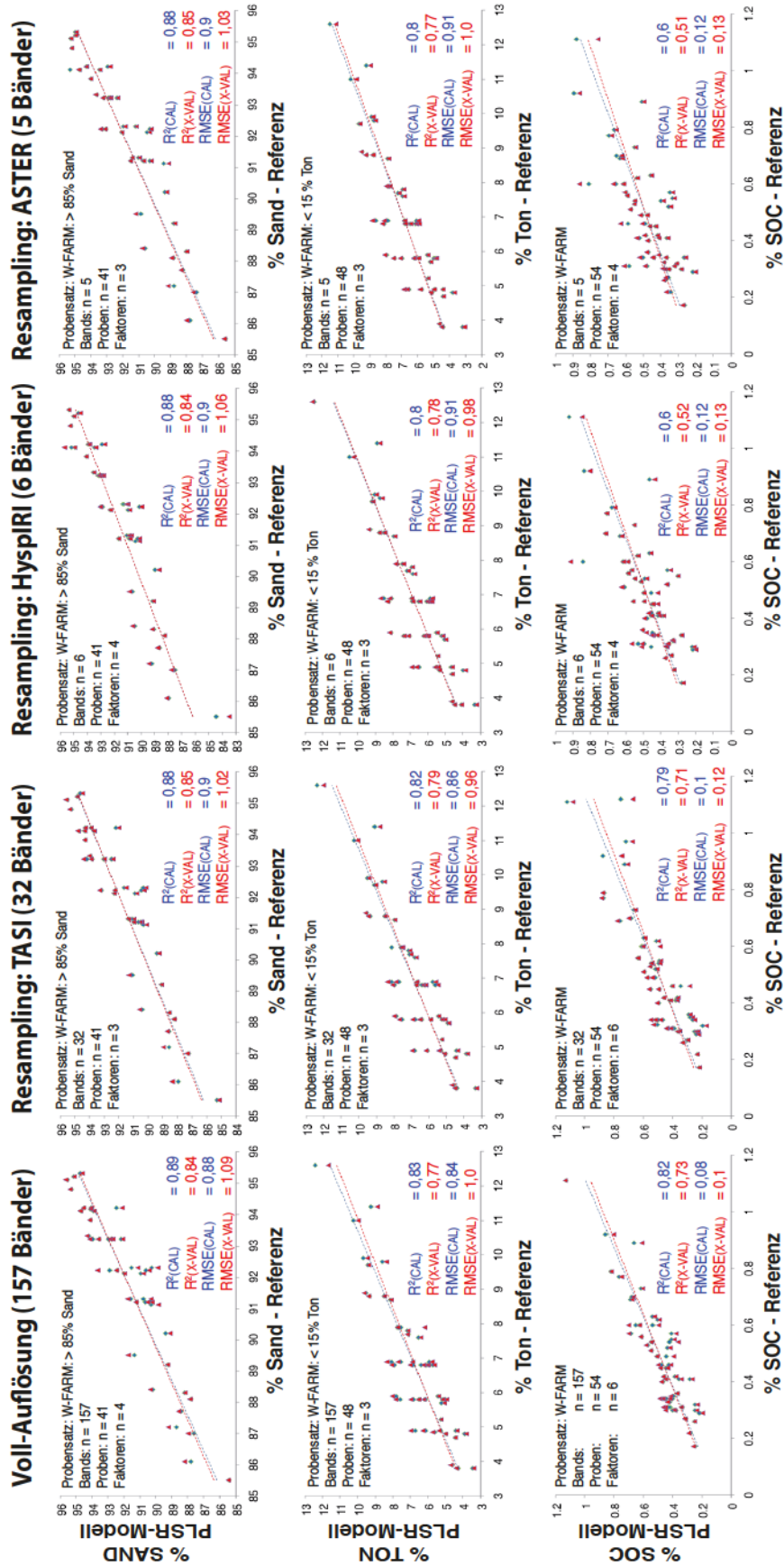


Abbildung 7.7: PLSR-Ergebnisse (Referenz versus PLSR-Modell) für die Vorhersage der drei Bodenparameter (Sand-, Ton- und SOC-Gehalt) aus der thermalen Sensorik für das Resampling von TASI, HypsIRI und ASTER.

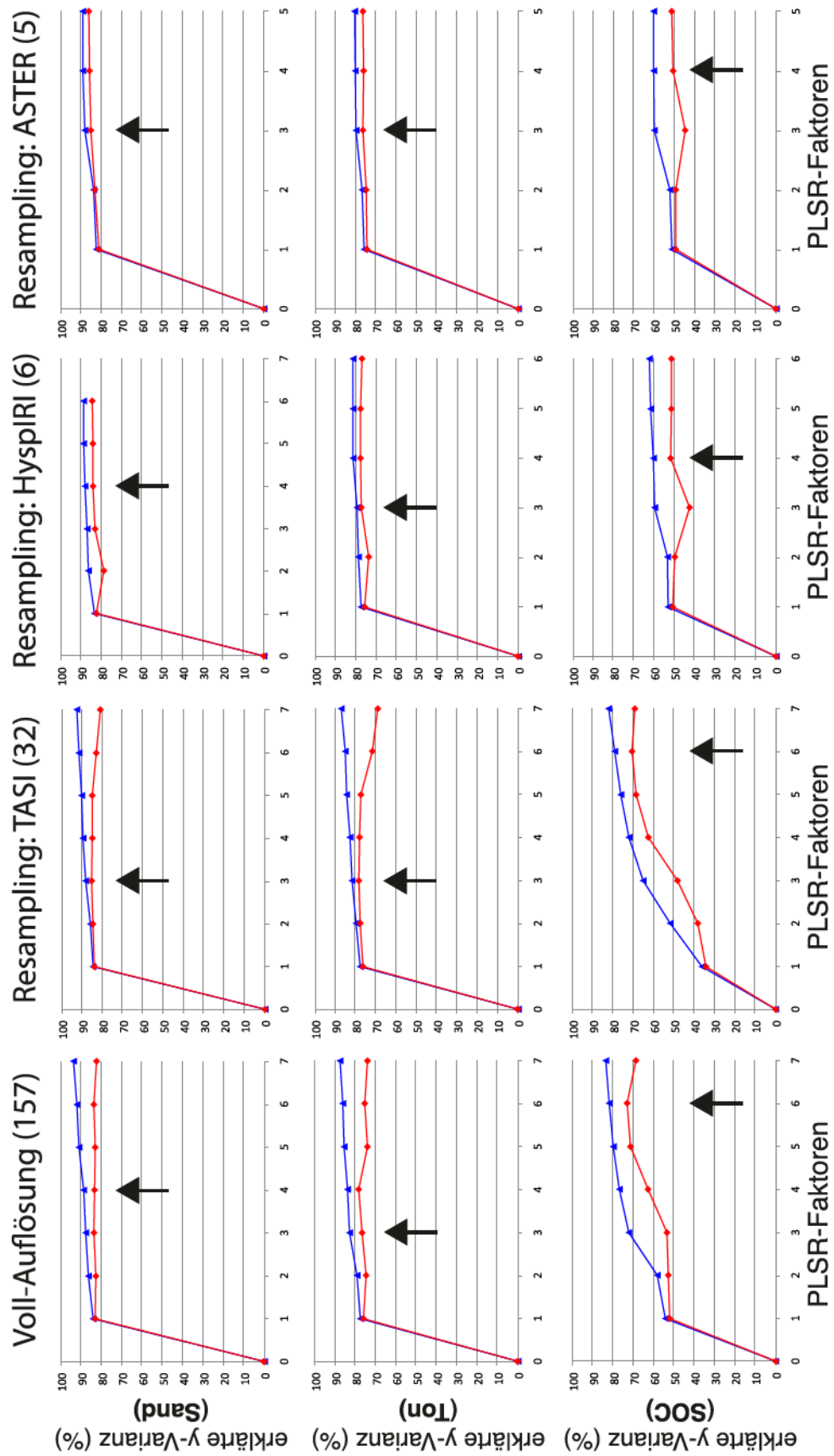


Abbildung 7.8: PLSR-Ergebnisse (erklärte y-Varianz) für die Vorhersage der drei Bodenparameter (Sand-, Ton- und SOC-Gehalt) aus der thermalen Sensorik für das *Resampling* von TASI, HyspIRI und ASTER.

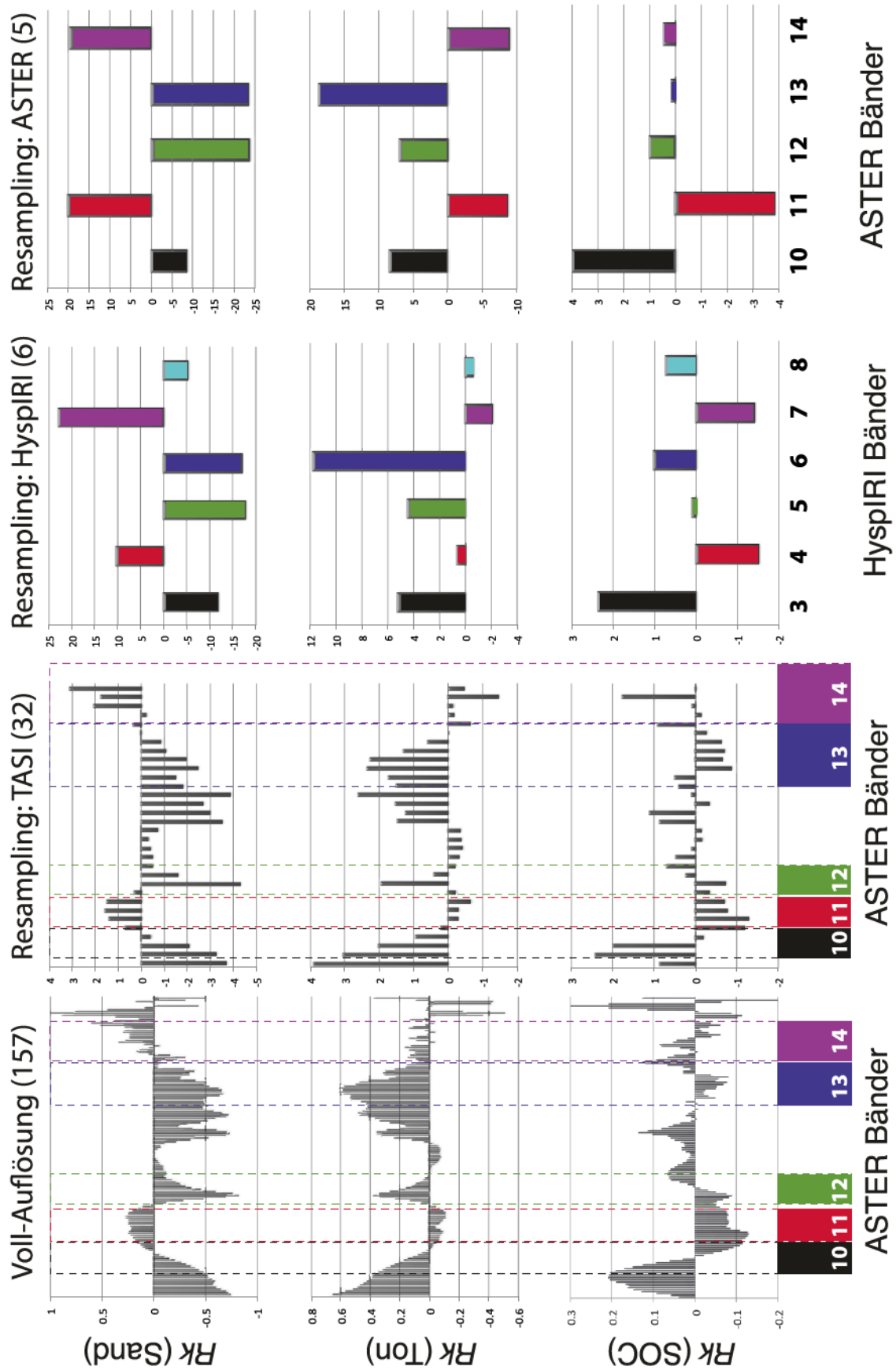


Abbildung 7.9: PLSR-Ergebnisse (Regressionskoeffizienten, R_k) für die Vorhersage der drei Bodenparameter (Sand-, Ton- und SOC-Gehalt) aus der thermalen Sensorik für die Voll-Auflösung sowie für das *Resampling* von TASI, HypsIRI und ASTER.

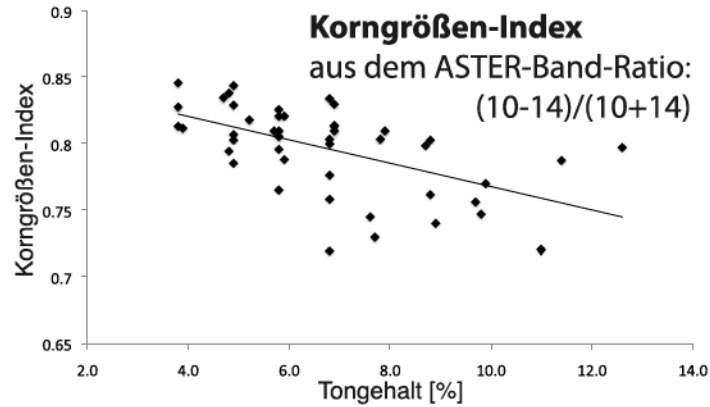


Abbildung 7.10: Korngrößen-Index nach Salisbury und D’Aria (1992b) (hier normalisiert) gegen den Tongehalt des Vergleichs-Probensatzes.

SOC-Modelle darunter merklich. Bei der Vorhersage des SOC-Gehaltes aus der Voll-Auflösung konnten die Schwächen der Modelle – wegen der vorwiegend indirekten Abhängigkeiten – durch den hyperspektralen Datenraum noch kompensiert werden (was sich auch hier schon durch eine deutlich erhöhte Faktorenzahl bemerkbar machte). Der reduzierte multispektrale Datenraum (HypIRI und ASTER) war dazu nicht mehr in der Lage (vgl. Abb. 7.7). Mit jedem weiteren *Resampling*-Schritt verschlechterten sich die Modellergebnisse. Die Vorhersage mittels der 32 TASI-Bändern ($\text{RMSE}(\text{X-VAL}) = 0.12 \%$ und erklärte y-Varianz = 71 %) lag noch im Bereich der Performanz der Voll-Auflösung. Dagegen konnte weder mit der HypIRI- ($\text{RMSE}(\text{X-VAL}) = 0.13 \%$ und erklärte y-Varianz = 52 %) noch mit der ASTER-Auflösung ($\text{RMSE}(\text{X-VAL}) = 0.13 \%$ und erklärte y-Varianz = 51 %) der y-Datenraum (SOC-Gehalt) ausreichend erklärt werden. Die Entwicklung der erklärten y-Varianzen über die Faktorenzahl sowie die Unterschiede zwischen der Kalibrierung und der Validierung der Modelle unterstreichen dies (vgl. Abb. 7.8). Mit der multispektralen Auflösung konnten keine robusten Modelle mehr aufgebaut werden. Das Entfernen der größten Ausreißer in den multispektralen Modellen konnte die Ergebnisse nur geringfügig verbessern.

Die Interpretation der R_k aus Abbildung 7.9 macht deutlich, warum die hyperspektrale Vorhersage des SOC-Gehaltes funktionierte, während die multispektrale scheiterte: Die potentielle spektrale Information, die für die Vorhersage zur Verfügung stand, konzentrierte sich in den multispektralen Modellen auf den spektralen Bereich von nur zwei Bändern (ASTER-Bänder 10 und 11). Die relativ schmalen spektralen Einflüsse im Wellenlängenbereich ab $\sim 9 \mu\text{m}$ ließen sich in den multispektralen SOC-Modellen nicht mehr auflösen. So trugen die ASTER-Bänder 12, 13 und 14 keine relevante spektrale Information mehr für die Vorhersage des SOC-Gehaltes bei. Die SOC-Modelle stützten sich daher fast ausschließlich auf den spektralen Bereich des ersten Quarzflügels bis $\sim 8,63 \mu\text{m}$, was für den Aufbau stabiler PLSR-Modelle nicht ausreichend war. Erschwerend kam hinzu, dass sich die Relevanz der Wellenlängen am Kaolinit-*Feature* bei $10,95 \mu\text{m}$ aus der Voll-Auflösung in den ASTER-Modellen nicht mehr entfalten konnte, da sich dieses sF genau im Überlappungsbereich der ASTER-Bänder 13 und 14 befand.

7.2 Vergleich der Quantifizierung der Bodenparameter aus der thermalen und der solar-reflektiven Sensorik (Voll-Auflösung und *Resampling* auf HyMap)

Im Folgenden werden die PLSR-Ergebnisse zur Quantifizierung der Bodenparameter aus der solar-reflektiven Sensorik vorgestellt und mit denen der thermalen Sensorik (vgl. Kap. 7.1) verglichen. Dazu wurden für die thermale Sensorik die Modelle der μ FTIR-Spektren herangezogen, die im selben Labor, unmittelbar vor den solar-reflektiven ASD-Messungen, aufgenommen wurden und auf einer möglichst identischen Bodenoberflächen basierten (vgl. Kap. 4). Für die solar-reflektive Sensorik wurden zwei unterschiedliche spektrale Spezifikationen in den Modellen berücksichtigt: zum einen die volle spektrale Auflösung des ASD (Voll-Auflösung) und außerdem das spektrale *Resampling* auf den HyMap-Sensor (vgl. Abb. 7.11).

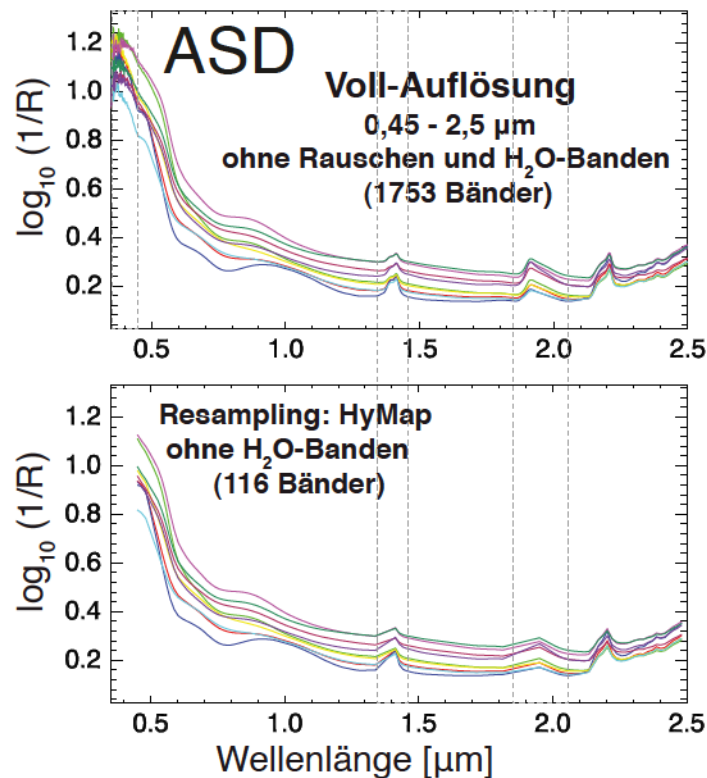


Abbildung 7.11: Spektrale Dimensionen, wie sie in die PLSR-Modellierung für die solar-reflektive Sensorik eingingen (Voll-Auflösung und *Resampling* auf HyMap).

Die quantitative Modellierung aus der solar-reflektiven Sensorik (sowohl für die Voll-Auflösung als auch fürs *Resampling*) basierte wieder auf den jeweils gleichen Vergleichs-Probensätzen (identischer y-Datenraum) für den Sand-, Ton-, und SOC-Gehalt, wie sie für die Modellierung aus der thermalen Sensorik verwendet wurden. Zwei der Bodenproben mussten jedoch aus diesen Probensätzen entfernt werden (MU027 und MU067), da sie die Ergebnisse der solar-reflektiven Modelle übermäßig verschlechtert hätten. Da beide Proben in den Modellen aller drei Bodenparameter als Ausreißer auffielen, wurden sie als spektrale Messfehler interpretiert (für den SOC-Gehalt war einer der Ausreißer nicht unter den Bodenproben des Vergleichs-Probensatzes SOC).

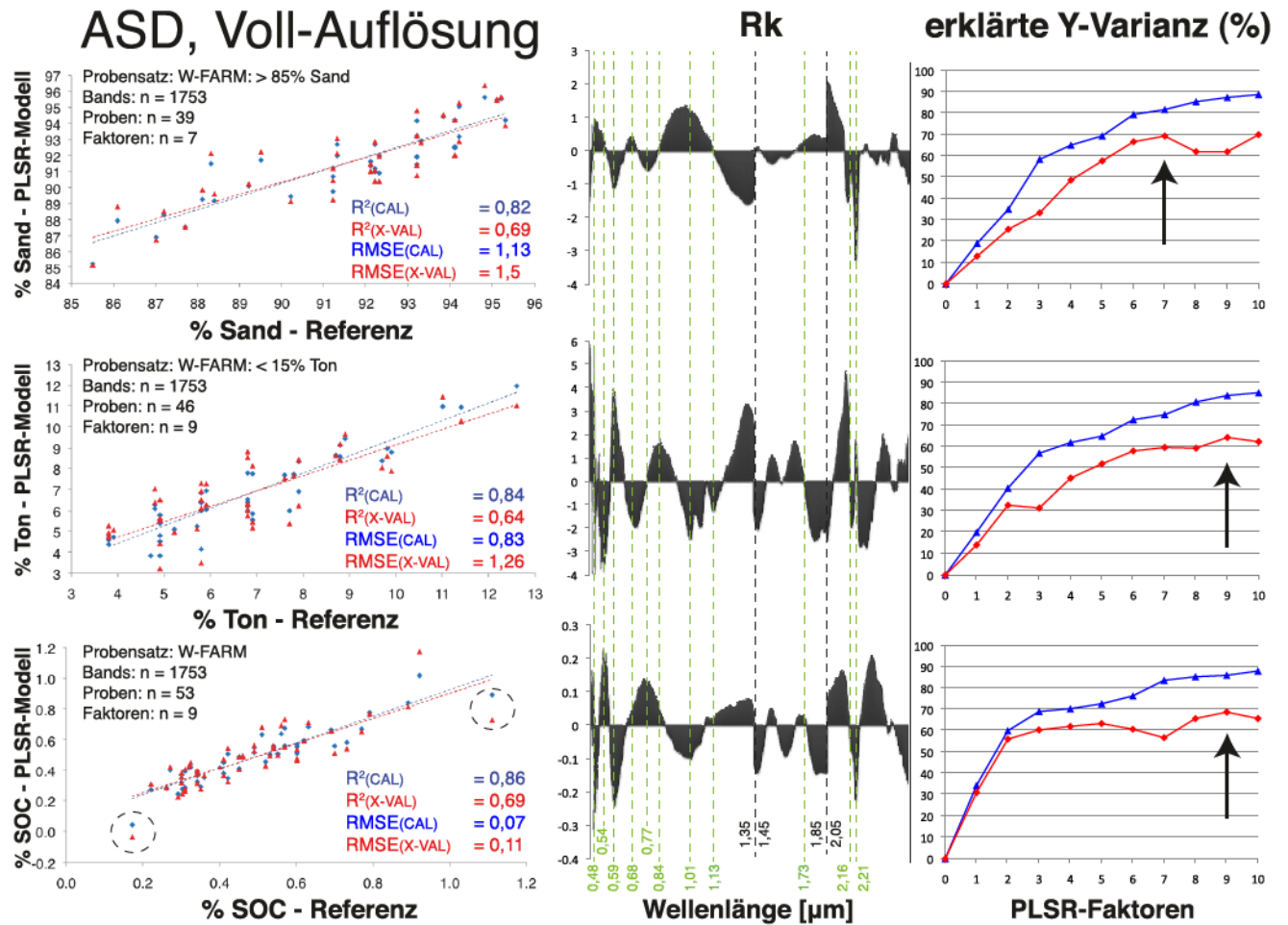


Abbildung 7.12: Ergebnisse der PLSR-Modellierung (Vorhersage, Regressionskoeffizienten (R_k) und erklärte y-Varianz) für den Sand-, Ton- und SOC-Gehalt mittels solar-reflektiver Sensorik (ASD) der Voll-Auflösung. Grün gestrichelt: markante Positionen der sD , schwarz gestrichelt: Positionen der entfernten H_2O -Bänder.

ASD, Resampling HyMap

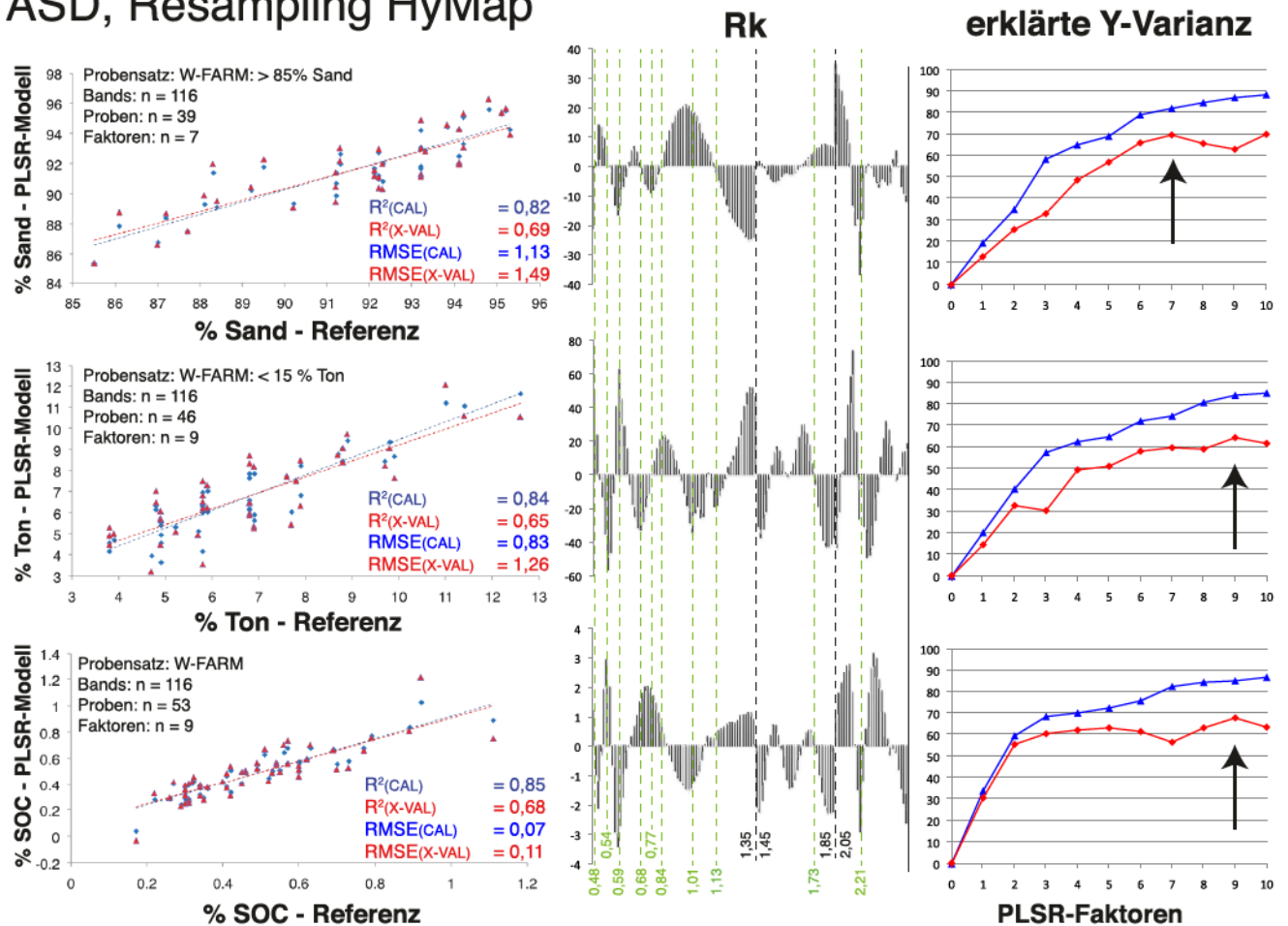


Abbildung 7.13: Ergebnisse der PLSR-Modellierung (Vorhersage, Regressionskoeffizienten (R_k) und erklärte y-Varianz) für den Sand-, Ton- und SOC-Gehalt mittels solar-reflektiver Sensorik (ASD) für das spektrale *Resampling* auf HyMap. Grün gestrichelt: markante Positionen der *sD*, schwarz gestrichelt: Positionen der entfernten H_2O -Bänder.

7.2.1 Vorhersage der Bodenparameter im Vergleich: VNIR-SWIR versus LWIR

Für die Quantifizierung aller drei Bodenparameter aus der solar-reflektiven Sensorik waren deutlich mehr Faktoren nötig als für die der thermalen Sensorik. Das spektrale *Resampling* der ASD-Spektren auf die HyMap-Spezifikation, welches die Anzahl der Bänder von 1753 auf 116 reduzierte, hatte auf die Ergebnisse der PLSR kaum einen Einfluss (vgl. Abb. 7.12 und Abb. 7.13) und konnte die relativ komplexen VNIR-SWIR-Modelle nicht vereinfachen. In Tabelle 7.2 sind die PLSR-Ergebnisse aus dem VNIR-SWIR (HyMap-Modelle) denen des LWIR (TASI-Modelle) gegenübergestellt.

	VNIR-SWIR (HyMap Resampling, 116 Bänder)				LWIR (TASI Resampling, 32 Bänder)			
	Erklärte Y-Varianz	RMSE (X-VAL)	NRMSE (X-VAL)	Anzahl Faktoren	Erklärte Y-Varianz	RMSE (X-VAL)	NRMSE (X-VAL)	Anzahl Faktoren
Sandgehalt	69 %	1,49 %	15,2 %	7	85 %	1,02 %	10,41 %	3
Tongehalt	65 %	1,26 %	14,32 %	9	79 %	0,96 %	11,0 %	3
SOC-Gehalt	68 %	0,11 %	11,7 %	9	71 %	0,12 %	12,77 %	6

Tabelle 7.2: Ergebnisse der PLSR-Vorhersage des Sand-, Ton- und SOC-Gehaltes (Vergleichs-Probensätze) aus dem VNIR-SWIR (HyMap-*Resampling*) und dem LWIR (TASI-*Resampling*).

Für die beiden Textur-Parameter fiel der Unterschied zwischen der solar-reflektiven und der thermalen Sensorik besonders deutlich aus. Die Modelle aus den Messungen der solar-reflektiven Sensorik konnten in der Vorhersage des Sandgehaltes nur 69 % der y-Varianz erklären und benötigten dafür 7 Faktoren bei einem Vorhersagefehler von 1,49 % (*LWIR*: y-Varianz = 85 %, 3-faktoriges Modell und RMSE(X-VAL) = 1,02 %). Für die Quantifizierung des Tongehaltes wurden sogar 9 Faktoren benötigt, womit nur 65 % der y-Varianz erklärt werden konnte bei einem RMSE(X-VAL) von 1,26 % (*LWIR*: y-Varianz = 79 %, 3-faktoriges Modell und RMSE(X-VAL) = 0,96 %). Der Vorhersagefehler in den solar-reflektiven Modellen wäre bei vergleichbar geringer Anzahl an Faktoren noch sehr viel höher ausgefallen.

Der Grund für die erhöhte Anzahl an PLSR-Faktoren in den solar-reflektiven Modellen konnte dabei nicht schlicht auf die höherer Anzahl an Bändern des HyMap- gegenüber des TASI-Sensors zurückgeführt werden, da auch in den thermalen Modellen der Voll-Auflösung vergleichbar wenige PLSR-Faktoren benötigt wurden (vgl. Kap. 7.1.1). Abbildung 7.8 zeigte bereits im spektralen *Resampling*, dass für die Vorhersagemodelle der Textur-Parameter die Anzahl der Sensorbänder keinen Einfluss auf die die Anzahl an benötigten PLSR-Faktoren hatte.

Die Vorhersage des SOC-Gehaltes lag mit 68 % nur knapp unterhalb der erklärten y-Varianz aus der thermalen Sensorik, brauchte dafür jedoch 9 Faktoren bei einem RMSE(X-VAL) von 0,11 % (*LWIR*: y-Varianz = 71 %, 6-faktoriges Modell und RMSE(X-VAL) = 0,12 %). Mit dem Entfernen der zwei extremsten Proben am unteren und am oberen Ende des y-Bereichs (vgl. Markierung in Abb. 7.12), mit denen das Modell sichtbar Probleme hatte, konnte das PLSR-Ergebnis verbessert werden (für die Voll-Auflösung mit 8 Faktoren: RMSE(X-VAL) = 0,09 % und erklärte y-Varianz 74 %). In den TIR-Modellen konnten diese Proben ohne Probleme modelliert werden.

Alle Modelle der solar-reflektiven Sensorik zeigten ihre Schwächen deutlich in der Entwicklung der y -Varianz über die Faktoren. Die relativ großen Unterschiede zwischen der Kalibrierung und der Validierung sowie die ungleichmäßige Entwicklung weisen auf ein Überfitten (Überanpassung) der Modelle hin und signalisieren deren Sensibilität für Vorhersagen. In Richtung zunehmender Faktorenzahl klaffen die Werte sichtbar auseinander. Die Vorhersage mit der solar-reflektiven Sensorik konnten für keinen der drei Bodenparameter mit ähnlich robusten Modellen realisiert werden wie es mit der thermalen Sensorik möglich war.

7.2.2 Interpretation der R_k

Die spektrale Interpretation der R_k sollte bei der Suche nach den Ursachen für das schlechtere Abschneiden der Modelle aus der solar-reflektiven Sensorik helfen. Einige der markanten spektralen Einflüsse stimmten exakt mit den Positionen der beschriebenen sF überein. Für alle drei Bodenparameter fiel der Einfluss des $SWIR$ mit der Kaolinit-Doppelbande bei $\sim 2,2 \mu\text{m}$ auf (beide sF bei $2,16$ und $2,21 \mu\text{m}$ sind im Modell der Voll-Auflösung zu erkennen). Besonders für den Ton- und SOC-Gehalt spielten dabei die Absorptionsschultern des *Features* die zentrale Rolle. Außerdem nutzten die Ton- und SOC-Modelle Bänder aus dem Wellenlängenbereich zwischen den beiden entfernten atmosphärischen Wasserbanden (insbesondere ab $\sim 1,73 \mu\text{m}$).

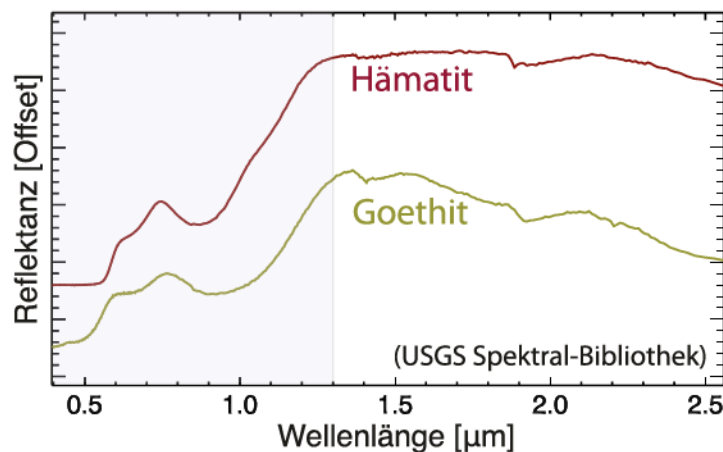


Abbildung 7.14: Spektrale Charakteristika von Eisenoxid (Hämatit) und Eisenhydroxid (Goethit), aus (Clark et al., 2007). Markiert der Bereich mit hohem spektralem Kontrast zwischen bis $\sim 1,3 \mu\text{m}$.

Der $VNIR$ bis $\sim 1,3 \mu\text{m}$ hatte einen mindestens genauso großen Einfluss auf die Modelle der solar-reflektiven Sensorik. Eine diskrete Beschreibung der sF im $VNIR$ ist aus den beschriebenen Gründen (vgl. Kap. 6.1) meist nur begrenzt möglich, was durch die erhöhte Faktorenzahl noch zusätzlich erschwert wurde. Vergleicht man die spektralen Einflüsse jedoch mit Referenz-Spektren typischer Minerale semiarider Böden (Eisenoxide/-hydroxide: Hämatit bzw. Goethit), die diesen Wellenlängenbereich im Allgemeinen dominieren, wird deren Einfluss auf die R_k deutlich (vgl. Abb. 7.14). Der hohe spektrale Kontrast zwischen $\sim 0,9$ und $\sim 1,3 \mu\text{m}$, der sowohl Hämatit als auch Goethit eigen ist, wird in den R_k beider Textur-Parameter markant abgebildet.

Vergleicht man außerdem die markierten Wellenlängenpositionen der spektralen Einflüsse aus den Abbildungen 7.12 und 7.13 mit den kontinuum-bereinigten Reflexions-Spektren der Bodenproben bis $1,3 \mu\text{m}$ (vgl. Abb. 7.15), kann angenommen werden, dass die Modellierung deren spektraler Formen bei der Quantifizierung eine bedeutende Rolle gespielt hat. In den kontinuum-

bereinigten Reflexions-Spektren zeigen sich auch die aus der Literatur bekannten sF für Hämatit und Goethit bei 880 bzw. 920 nm (vgl. Kap. 6.1). Dabei wird deutlich, dass die Modelle zur Quantifizierung anstatt dieser Extrempunkte (wie etwa Absorptionstiefen) v.a. Wendepunkte und Absorptionsschultern favorisierten. Ein sF , das sich ungewöhnlich konstant und diskret zeigte, war das sF von Goethit bei $0,48 \mu\text{m}$. Es eignete sich zudem ausgezeichnet, um die braun-roten von den braun-gelben Böden zu unterscheiden.

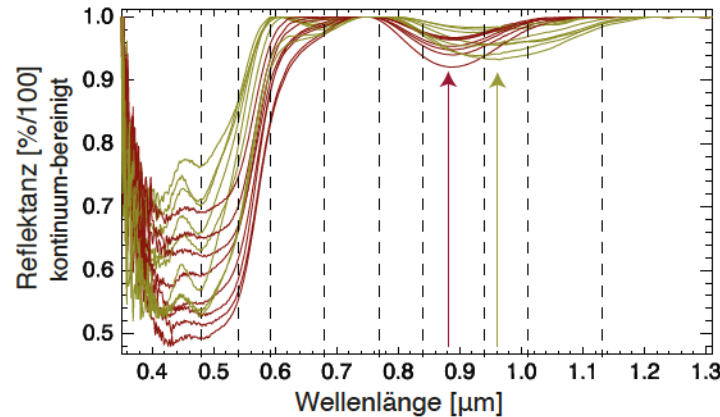


Abbildung 7.15: Auswahl von Reflexions-Spektren (kontinuum-bereinigt) im *VNIR* braun-roter und braun-gelber Böden aus dem Untersuchungsgebiet. Gestrichelt markiert sind die markante Positionen der sD aus Abb. 7.12 und 7.13. Der rote und der gelbe Pfeil zeigen aus der Literatur bekannte sF von Hämatit bzw. Goethit.

Vor diesem Hintergrund wurden für die solar-reflektiven Modelle aller drei Bodenparameter die sD Kaolinit, Goethit und Hämatit festgelegt. Die *VNIR-SWIR*-Modelle wurden als nicht ausreichend opto-physikalisch fundiert bewertet. Während für das *SWIR* eine opto-physikalische Grundlage für die Quantifizierung des Ton- und Sandgehaltes noch gegeben wäre (auch wenn hierbei der Einfluss von Mineral-*Feature* im Vordergrund stand und direkt korngößenabhängige spektrale Einflüsse, die in den Modellen der thermalen Sensorik eine zentrale Rolle spielten, nur schwer auszumachen waren), ist dies für den *VNIR* nicht mehr der Fall.

Ein möglicher indirekter Zusammenhang könnte sich wie folgt erklären: Der eigentlich geringe Gehalt an Eisenoxiden/-hydroxiden konzentriert sich auf die Ummantelungen (*coatings*) der Bodenkörner (vgl. Kap. 6.1), welche auch für den auffallend sichtbaren Farbeindruck der Böden verantwortlich sind. Die spezifische Oberfläche nimmt mit abnehmendem Korndurchmesser stark zu, wodurch eine indirekte Abhängigkeit der Korngröße von den spektralen Eigenschaften dieser Minerale plausibel erscheint. Dieser schon relativ komplizierte Bezug wird noch erschwert durch die spektralen Unterschiede von Hämatit und Goethit, da beide Minerale unabhängig von der Korngröße in den braun-roten und den braun-gelben Bodenproben auftreten und vom Modell mit berücksichtigt werden müssen. Diese Umstände werden für die relativ komplizierten (hohe Faktorenzahl) und sensiblen Modelle aus der solar-reflektiven Sensorik verantwortlich gemacht.

7.2.3 Interpretation der *W-loadings*

Die Rk aus den Vorhersagen mit hohen Faktorenzahlen sind oft schwer zu interpretieren, da sich etwaige Unsicherheiten aus den einzelnen Faktoren darin akkumulieren. Dies trifft insbesondere für Modelle mit ungleichmäßiger Entwicklung der y-Varianz über die Faktoren zu sowie bei großen Unterschieden zwischen der Kalibrierung und Validierung. Daher soll an dieser Stelle noch

ein tieferer Blick in die Modelle der solar-reflektiven Sensorik geworfen werden. In Abbildung 7.16 sind die *W-loadings* der einzelnen Faktoren für die Sand- und Ton-Modelle (Voll-Auflösung) dargestellt. Die *W-loadings* aller fürs Modell verwendeten Faktoren gingen in die Berechnung der *Rk* ein und drückten darin den Bezug zur y-Variablen aus (vgl. Kap. 4.3).

In den *W-loadings* der Modelle zeigte sich die inverse Beziehung zwischen dem Sand- und Tongehalt noch deutlicher als in den *Rk* (ab dem Faktor 5 verliert sich diese Schärfe). Dies veranschaulicht nochmals, dass beide Modelle auf die gleichen spektralen Informationen zurückgriffen, die für die jeweilige Vorhersage invers genutzt wurden.

Die Rangfolge der *W-loadings* für beide Textur-Parameter signalisiert die Vorliebe der Modelle für die spektrale Information aus dem *VNIR* bis $\sim 1,3 \mu\text{m}$, der bereits oben als sehr stark von Eisenoxiden/-hydroxiden beeinflusst beschrieben wurde. Der relativ hohe spektrale Kontrast, den diese Minerale in den Spektren erzeugten, führte zu großer Varianz im entsprechenden Bereich des X-Datenraums, den das Modell für die Modellierung der Textur-Parameter in den ersten Faktoren bevorzugte. Erst ab dem Faktor 4 zeigten sich die textur-relevanten *sF* des *SWIR* (vgl. den Bereich des Kaolinit-Feature bei $\sim 2,2 \mu\text{m}$) in den *W-loadings*. Wobei auch für diese höheren Faktoren der Einfluss des *VNIR* noch merklich vorhanden war.

Vor diesem Hintergrund stellte sich unweigerlich die Frage, ob der Wellenlängenbereich bis $1,3 \mu\text{m}$ für die Vorhersage des Sand- und Tongehaltes überhaupt von Vorteil war? Oder ob eine möglicherweise sehr komplexe Beziehung zwischen diesem Wellenlängenbereich und der y-Variablen die Modellierung vielmehr negativ beeinträchtigte?

Es zeigte sich, dass die Quantifizierung der beiden Textur-Parameter aus einem auf den *SWIR* reduzierten Wellenlängenbereich ($1,3 - 2,5 \mu\text{m}$) die Vorhersageergebnisse noch verschlechterte. Mit dem *SWIR*-Modell (Voll-Auflösung, 902 Bänder) wurde der Sandgehalt mit einem RMSE(X-VAL) von 1,73 % vorhergesagt, wobei das Modell nur 60 % der y-Varianz erklären konnte. In der Vorhersage des Tongehaltes konnten sogar nur noch 52 % y-Varianz erklärt werden (RMSE(X-VAL) = 1,47 %). In beiden Fällen waren 7 Faktoren nötig, bei extrem sensiblen Modellen. Die Vorhersage des SOC-Gehaltes aus den 902 Bändern des *SWIR* blieb dagegen auf dem Niveau der Vorhersage aus dem gesamten *VNIR-SWIR* (RMSE(X-VAL) = 0,11 % und erklärte y-Varianz = 69 %), allerdings wurden dafür nur 4 Faktoren benötigt. Dies zeigt, dass die Wellenlängen bis $1,3 \mu\text{m}$ für die Vorhersage des SOC-Gehaltes überflüssig waren.

Zusätzlich wurde getestet, ob sich die *VNIR-SWIR*-Modelle mithilfe einer Variablenselektion noch optimieren ließen. Dazu wurden die *Rk* des gesamten Wellenlängenbereichs des *VNIR-SWIR* mittels eines *jack-knifing*-Verfahrens nach Martens und Martens (1999) auf ihre Signifikanz untersucht. Auf Grundlage der Modelle aus den Kreuz-Validierungen wurden dafür die Standardabweichungen der *Rk* bestimmt und mithilfe eines t-Tests deren Signifikanz berechnet (Prüfung auf 95%-Vertrauenswahrscheinlichkeit). Nicht signifikante spektrale Bänder wurden entsprechend entfernt, um so möglicherweise die Robustheit der Modelle zu erhöhen.

Mit der Variablenselektion konnte für die Vorhersage des Sand- und des SOC-Gehaltes eine Verbesserung erzielt werden. Der spektrale Datenraum des Sand-Modells wurde dabei auf 576 Bänder reduziert, auf deren Grundlage der Sandgehalt mit einem RMSE(X-VAL) von 1,43 % vorhergesagt werden konnte und 74 % der y-Varianz vom Modell erklärt wurden. Der SOC-Gehalt wurde mithilfe der Variablenselektion (256 Bändern) mit einem RMSE(X-VAL) von 0,1 % und einer erklärten y-Varianz von 72 % vorhergesagt. In beiden Fällen wurden die Modelle durch die Variablenselektion robuster. Im Ton-Modell dagegen klassifizierte die Variablenselektion nur

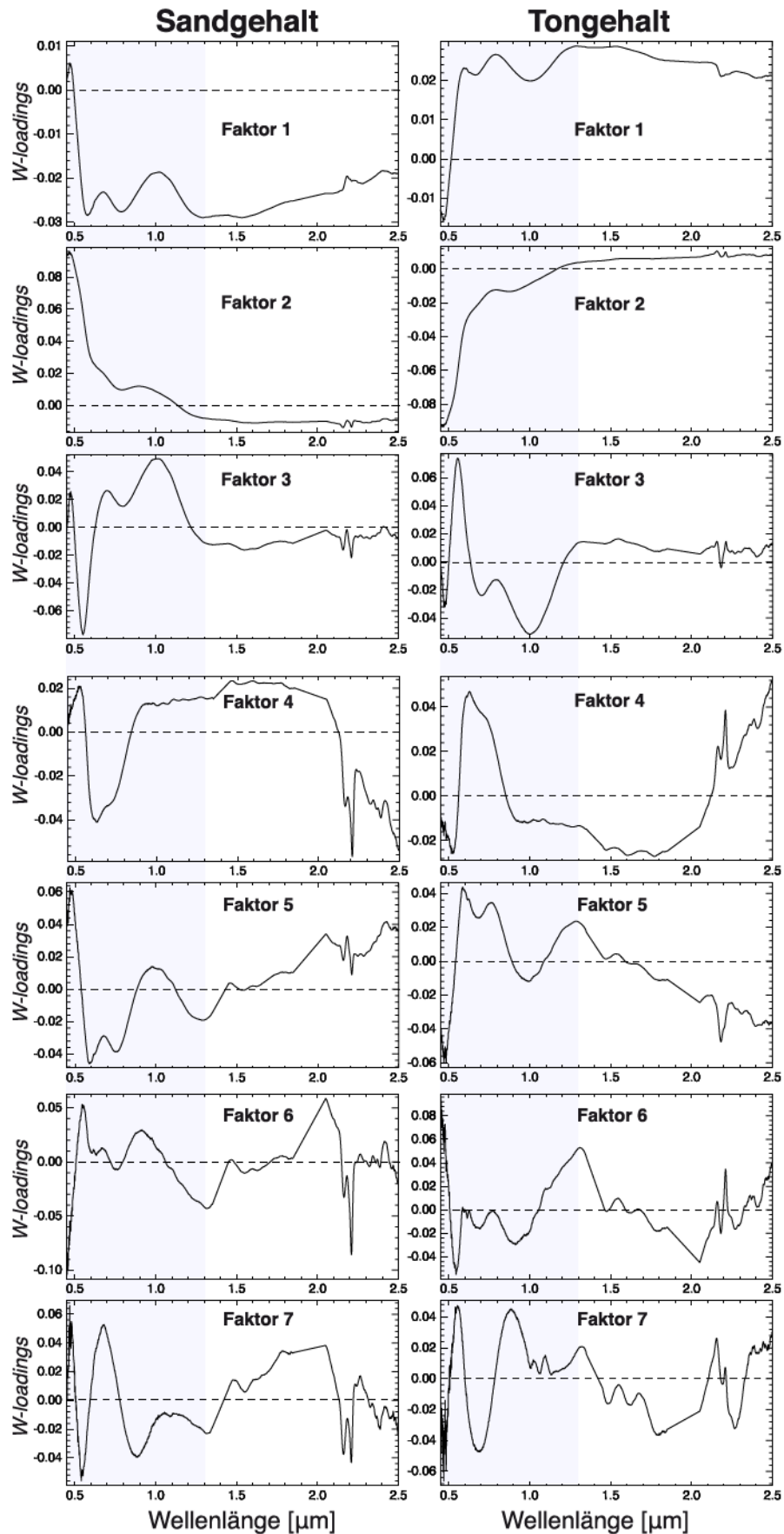


Abbildung 7.16: *W-loadings* der PLSR-Modelle für die Vorhersage des Sand- und Tongehaltes. Markiert der VNIR bis 1,3 μm , wo Eisenoxide/-hydroxide starken spektralen Einfluss zeigen. Die Faktoren 8 und 9 des Ton-Modells sind nicht dargestellt.

201 Bänder als signifikant, mit denen nur 42 % der Varianz aus dem Sandgehalt erklärt werden konnten ($\text{RMSE(X-VAL)} = 1,61 \%$).

7.3 Quantifizierung des Geo-Chemismus (*XRF*-Analyse) mittels thermaler Sensorik (*Resampling* auf fünf *LWIR* ASTER-Bänder)

Die überzeugende Leistungsfähigkeit der thermalen Sensorik, die sich besonders eindrucksvoll in den Sensormodellen auf Grundlage des spektralen *Resamplings* zeigte (vgl. Kap. 7.1.2), gab Anlass für den Versuch, auch den Geo-Chemismus aus der *XRF*-Analyse mittels der fünf thermalen ASTER-Bänder in einer PLSR zu quantifizieren. Für diesen Versuch stand außerdem der weitaus umfangreichere Datensatz OST-WEST mit 148 Proben zur Verfügung (vgl. Tabelle 4.1). Grundlage dieser Modellierung waren daher die MIDAC-Spektren. Die Modellierung wurde für alle aus der *XRF*-Analyse resultierenden 22 Elemente/Oxide durchgeführt (vgl. Tabelle C.1). Im Rahmen dieser Arbeit werden jedoch nur die Modelle des Siliciumdioxid (SiO_2)- und des Aluminiumoxid (Al_2O_3)-Gehaltes vorgestellt, welche die mineralogische Grundlage der untersuchten Textur-Parameter (Sand- und Tongehalt) bildeten. Die Zusammenhänge zwischen den Textur-Parametern und dem SiO_2 - bzw. dem Al_2O_3 -Gehalt sind wie erwartet hoch, was die Kreuz-Korrelationen in Abbildung 7.18 belegen. (Die Kreuz-Korrelationen basieren auf 70 Proben, für die Messungen aus beiden Analyse-Verfahren zur Verfügung standen). An dieser Stelle soll noch einmal darauf hingewiesen werden, dass sich die Ergebnisse der *XRF*-Analyse auf die gemahlten Bodenproben beziehen. Die zur Quantifizierung verwendeten *LWIR*-Spektren sind nach wie vor die der originalen Bodenproben.

Die Ergebnisse der Quantifizierung mittels der PLSR-Modelle aus der ASTER-Auflösung sind in Abbildung 7.17 zusammengefasst. SiO_2 (Quarz), als das die Sand-Fraktion dominierende Mineral, konnte auf Grundlage der fünf thermalen ASTER-Bänder mit einem RMSE(X-VAL) von 2,13 % vorhergesagt werden ($\text{NRMSE} = 0,052 \%$). Mit dem 4-faktorigen Modell konnten 93 % der y-Varianz erklärt werden. Das auffallend gute Ergebnis wird im Zusammenhang mit dem starken und direkten Einfluss der molekularen Fundamental-Schwingungen der Si-O Bindungen auf diesen Wellenlängenbereich gesehen. Der Gehalt an Al_2O_3 geht maßgeblich aus den Tonmineralen (hier v.a. Kaolinit, $\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$) der Ton-Fraktion der Böden hervor. Kaolinit wurde sowohl spektral als auch in der *XRD*-Analyse als das dominierende Tonmineral in den Böden nachgewiesen. Der Gehalt an Al_2O_3 wurde mit einem RMSE(X-VAL) von 0,84 % vorhergesagt ($\text{NRMSE} = 0,076 \%$). Dabei wurden mit nur einem Faktor 84 % der y-Varianz erklärt. Die gleichmäßige Entwicklung der erklärten y-Varianz sowie deren minimale Unterschiede zwischen der Kalibrierung und der Validierung unterstreichen die Robustheit dieser beiden PLSR-Modelle.

Alle Modelle der Elemente/Oxide, deren Quantifizierung mittels der fünf ASTER-Bänder realisiert werden konnte (SiO_2 , TiO_2 , Al_2O_3 , Fe_2O_3 , K_2O , P_2O_5 , LOI , Cr, Rb und V), sind im Anhang mit ihren entsprechenden *Rk* und y-Varianzen zusammengefasst (vgl. Abb. B.1 bzw. B.2). Nachfolgend sind die Elemente/Oxide aufgeführt, für welche auf dieser spektralen Grundlage keine stabilen Modelle erzeugt werden konnten: MnO , MgO , CaO , Na_2O , Ba, Ga, Nb, Ni, Sr, Y, Zn und Zr.

Abschließend sollen noch anhand der *Rk* der entsprechenden MIDAC-Modelle aus der Voll-Auflösung die spektralen Einflüsse im Detail verdeutlicht werden (vgl. Abb. 7.19, zu diesen Modellen sind ausschließlich die *Rk* abgebildet). Diese Modelle basierten auf einem erweiterten spektralen Bereich von 7,5 bis 15,0 μm (174 Kanäle) und schlossen damit noch Wellenlängen ein,

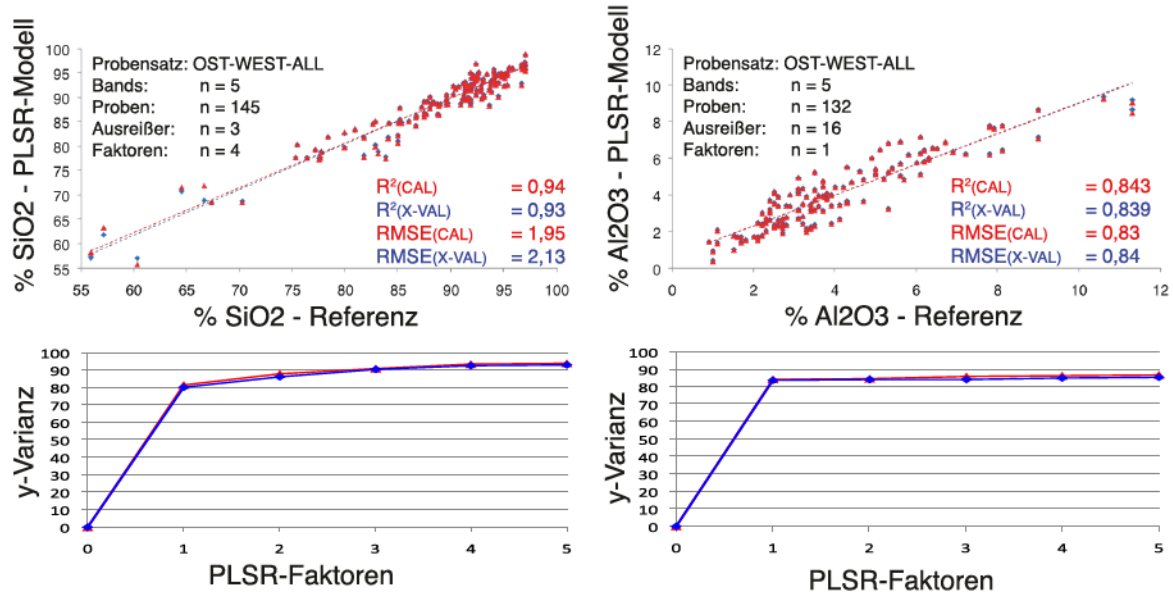
Quantifizierung der XRF Ergebnisse aus der thermalen Sensorik (LWIR)
 MIDAC-Spektren (ASTER - Resampling, 5 Bänder)


Abbildung 7.17: Quantifizierung des SiO₂- und des Al₂O₃-Gehaltes aus den MIDAC-Spektren (ASTER-Resampling, 5 Bänder): Vorhersage (Referenz versus PLSR-Modell) und die Entwicklung der erklärten y-Varianz über die Faktoren.

	SOC (%)	Ton (%)	Sand (%)	SiO ₂ (%)	Al ₂ O ₃ (%)
SOC (%)	1.000	-0.069	-0.162	-0.133	0.005
Ton (%)	-0.069	1.000	-0.895	-0.902	0.922
Sand (%)	-0.162	-0.895	1.000	0.953	-0.892
SiO ₂ (%)	-0.133	-0.902	0.953	1.000	-0.956
Al ₂ O ₃ (%)	0.005	0.922	-0.892	-0.956	1.000

Abbildung 7.18: Kreuz-Korrelationen (R^2 -Werte) der Bodenparameter SOC-, Ton- und Sandgehalt sowie des Geo-Chemismus für den SiO₂- und den Al₂O₃-Gehalt für 70 Bodenproben, die sowohl in der Bodenanalytik als auch in der XRF-Analyse berücksichtigt wurden.

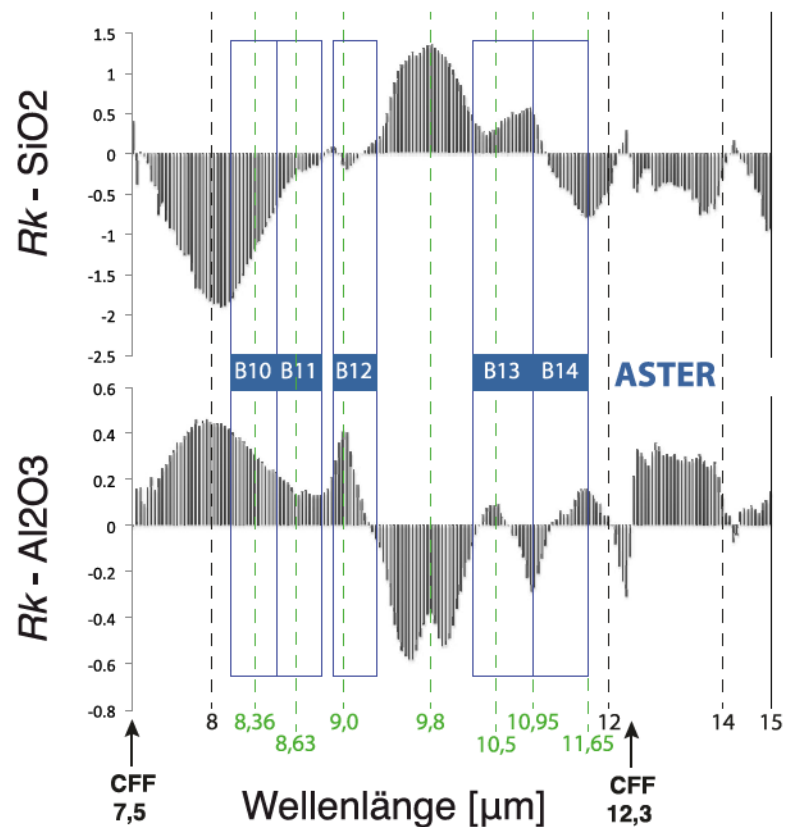


Abbildung 7.19: Regressionskoeffizienten (R_k) der PLSR-Modelle des SiO_2 - und des Al_2O_3 -Gehaltes für den kompletten Wellenlängenbereich der MIDAC-Spektren von 7,5 bis 15 μm (174 Kanäle). Grün gestrichelt markiert sind die Positionen der beschriebenen sF aus Abb. 6.2 u. 6.10. Blau umrandet sind die spektralen Bereiche der fünf ASTER-Bänder im *LWIR* (B11 – B14).

die außerhalb der *CFF* lagen. Auf dieser spektralen Grundlage konnte der SiO_2 -Gehalt mit einem RMSE(X-VAL) von 2,7 % vorhergesagt werden, bei 84 % erklärter *y*-Varianz (Al_2O_3 -Gehalt: RMSE(X-VAL) = 0,96 %; erklärte *y*-Varianz = 86 %).

Eine inverse Beziehung, wie sie sich in den *Rk* der Vorhersagemodelle zwischen den beiden Textur-Parametern aus der Voll-Auflösung darstellte (vgl. Abb. 7.9), konnte für den SiO_2 - und den Al_2O_3 -Gehalt nur noch teilweise beobachtet werden. Die feinen und markanten *sF* von Kaolinit bei 9,0 μm , bei 9,8 μm und bei 10,95 μm wurden nur noch in den Al_2O_3 -Modellen abgebildet, wie es sich auch aus der Mineralogie dieser Tonminerale und deren spektralen Merkmale ergibt. Waren die Modelle des Tongehaltes wegen ihres direkten Zusammenhangs mit den identifizierten *sD* bereits als opto-physikalisch fundiert bezeichnet worden, müssten die Al_2O_3 -Modelle in puncto Kausalität noch höher eingestuft werden, da hier Ursache (Energie-Übergangsprozesse der entsprechenden Minerale durch Vibrationen im *LWIR*) und Wirkung (spektrale Merkmale der *LWIR*-Bodenspektren) noch direkter miteinander verknüpft sind. Dieser direkte Zusammenhang zwischen den *X*- und der *y*-Variablen könnte sehr wahrscheinlich unter Verwendung der spektralen Signaturen von den gemahlenen Proben (wie sie auch in die *XRF*-Analyse eingingen) noch weiter optimiert werden. Die Abbildung zeigt zudem, wo jenseits der ASTER-Kanäle noch Potential für eine Quantifizierung des SiO_2 - und des Al_2O_3 -Gehaltes liegt. Dabei muss aber der spektrale Bereich des atmosphärischen Fensters im *LWIR* (8 – 14 μm) mit berücksichtigt werden.

7.4 Zusammenfassung und Fazit

Die quantitative Modellierung der Bodenparameter Sand-, Ton- und SOC-Gehalt wurde für die thermale (μFTIR , MIDAC und DHR) und die solar-reflektive (ASD) Sensorik untersucht. Dabei wurden mithilfe eines spektralen *Resamplings* unterschiedliche Sensor-Spezifikationen berücksichtigt (Voll-Auflösung, TASI-600 bzw. HyMAP, HypIRI und ASTER). Für jeden Bodenparameter wurde ein Vergleichs-Probensatz definiert, der repräsentativ für den pedologischen Charakter der Ackerflächen im Untersuchungsgebiet Mullewa war. Außerdem garantierten die Vergleichs-Probensätze einen identischen *y*-Bereich (Datenraum des jeweiligen Bodenparameters) für die Gegenüberstellung der *Resampling*-Ergebnisse sowie für den Vergleich der thermalen und der solar-reflektiven Sensorik, was die Interpretation der PLSR-Ergebnisse erleichterte.

Thermale Sensorik – Voll-Auflösung

Für die Bodenspektren der thermalen Sensorik der Voll-Auflösung lieferte die Quantifizierung für alle drei Bodenparameter überzeugende Ergebnisse. Für den jeweiligen Bodenparameter war die Vorhersagegenauigkeit unter den drei verwendeten thermalen Spektrometern ähnlich hoch. Der Sandgehalt konnte aus den Bodenspektren des μFTIR mit einem RMSE(X-VAL) von 1,09 % und einem R^2 von 0,84 vorhergesagt werden (MIDAC: RMSE(X-VAL) = 0,97 % und R^2 = 0,85; DHR: RMSE(X-VAL) = 0,92 % und R^2 = 0,88). Der Tongehalt wurde aus den Bodenspektren des μFTIR mit einem RMSE(X-VAL) von 1,0 % und einem R^2 von 0,77 vorhergesagt (MIDAC: RMSE(X-VAL) = 0,96 % und R^2 = 0,73; DHR: RMSE(X-VAL) = 1,05 % und R^2 = 0,77). Die Vorhersage des SOC-Gehalt konnte mit einem RMSE(X-VAL) von 0,1 % und einem R^2 von 0,73 durchgeführt werden (MIDAC: RMSE(X-VAL) = 0,1 % und R^2 = 0,78; DHR: RMSE(X-VAL) = 0,12 % und R^2 = 0,7).

Vergleicht man die PLSR-Ergebnisse der drei Bodenparameter untereinander, so konnten die Sand-Modelle den größten Anteil ihrer y-Varianzen erklären, gefolgt von den Ton- und den SOC-Modellen. In puncto Robustheit bzw. Stabilität schnitten die Modelle der Textur-Parameter (Sand- und Tongehalt) am besten ab. Dies unterstrich zum einen die gleichmäßige Entwicklung der y-Varianzen über die wachsende Faktorenzahl in der Kalibrierung und der Validierung. Zum anderen waren die Unterschiede der y-Varianzen zwischen der Kalibrierung und der Validierung in den Modellen der Textur-Parameter sehr gering. Die Vorhersage des SOC-Gehaltes zeigte sich am wenigsten robust, was auch die höchste Anzahl an benötigten Faktoren (5 – 6) dieser Modelle signalisierte. Die Modelle der Textur-Parameter hatten dagegen schon nach 3 – 4 Faktoren das Maximum an erklärbarer y-Varianz erreicht und zeigten sich bereits nach den ersten beiden Faktoren als äußerst robust. Vergleicht man die PLSR-Modelle der drei Bodenparameter untereinander hinsichtlich ihrer Vorhersagegenauigkeiten anhand des dimensionslosen normalisierten mittleren Vorhersagefehlers NRMSE, fällt auf, dass diese für die Voll-Auflösung ähnlich waren (NRMSE der μ FTIR-Modelle: Sandgehalt = 11,12 %, Tongehalt = 11,36 % und SOC-Gehalt = 10,64 %).

Die spektrale Interpretation anhand der Regressionskoeffizienten (R_k) offenbarte die dominierenden spektralen Einflüsse, die den Vorhersagemodellen der Bodenparameter zugrunde lagen. Die R_k der Modelle (als Funktion der Wellenlänge) zeigten dabei meist große Übereinstimmungen mit den spektralen Charakteristika der mineralogischen Bodenbestandteile sowie den physikalischen bzw. makroskopischen Bodeneigenschaften, die in Kapitel 6 identifiziert und beschrieben wurden. Dabei zeichneten sich drei wesentliche spektrale Einflüsse auf die Vorhersagemodelle der Textur-Parameter (Sand- und Tongehalt) ab:

1. Die Reduktion des spektralen Kontrastes in den Reststrahlenbändern (RB) mit abnehmender Korngröße. Für die Modelle war dabei der markante Reflektanz-Anstieg im ersten Quarzflügel (bis $\sim 8,63 \mu\text{m}$) der Quarz-Doppelbande von zentraler Bedeutung. Zudem zeigte sich im Bereich des Plateaus des ersten Quarzflügels in allen Modellen ein prägnantes Merkmal bei $8,36 \mu\text{m}$, das bisher keinem Bodenparameter zugeordnet werden konnte.

2. Das Kaolinit-*Feature* bei $9,0 \mu\text{m}$ trat in den R_k der PLSR-Modelle deutlich in Erscheinung (die Absorptionsschultern dieses *Features* wurden in den meisten Fällen mit modelliert). Außerdem zeigten die Modelle den Einfluss von weiteren Kaolinit-*Features* bei $9,8 \mu\text{m}$ und bei $10,95 \mu\text{m}$, die aber teilweise von den Effekten der Volumenstreuung überlagert wurden (s. Punkt. 3)

3. Der Einfluss des Transparenz-*Features* bei Wellenlängen $> 9,8 \mu\text{m}$, durch den korngrößenabhängigen Effekt der Volumenstreuung, zeigte auf die Modelle der Textur-Parameter eine große Wirkung. Auffallend hohe R_k signalisierten die Relevanz dieses spektralen Bereichs für die Modelle. Der Verlauf der R_k spiegelte dabei die spektrale Dynamik der Bodenspektren im Wirkungsbereich der Volumenstreuung durch den Einfluss der Korngröße wider, wie er in Kapitel 6 beschrieben wurde. Dabei spielte der Reflektanz-Anstieg/-Abfall zu und von dem Kaolinit-*Feature* bei $10,95 \mu\text{m}$ eine zentrale Rolle.

Auf dieser Grundlage konnten für die Vorhersagemodelle des Sand- und des Tongehaltes die spektralen *Driver* (sD) **Quarz**, **Kaolinit** und **Korngröße** identifiziert werden. Wegen des direkten Zusammenhanges zwischen den sD und den Bodenparametern, wurden beide Modelle als opto-physikalisch fundiert bezeichnet.

Die spektralen Einflüsse auf die Vorhersagemodelle des SOC-Gehaltes unterschieden sich davon in erster Linie im Wirkungsbereich der Volumenstreuung, ab $\sim 9,8 \mu\text{m}$, wo die SOC-Modelle deutlich weniger Relevanz zeigten. Durchgängig hohe R_k in diesem Wellenlängenbereich, die vor

und nach dem Kaolinit-*Feature* bei $10,95 \mu\text{m}$ auftraten, beschränkten sich auf die Modelle der Textur-Parameter. Für die SOC-Modelle dominierte der spektrale Einfluss aus der ε -Tripelbande zwischen $7,9$ und $9,8 \mu\text{m}$, die sich aus der Präsenz der Minerale Quarz und Kaolinit ergab. Neben dem Kaolinit-*Feature* bei $9,0 \mu\text{m}$ war hier vor allem der Bereich des ersten Quarzflügels bis $8,63 \mu\text{m}$ von großer Bedeutung, der markant von dem spektralen Merkmal bei $8,36 \mu\text{m}$ durchtrennt wurde. Ein eindeutiger spektraler Einfluss von aus der Literatur bekannten *sF* organischer Verbindungen im *LWIR* konnte in den SOC-Modellen nicht nachgewiesen werden. Der indirekte Einfluss über die Mineral-*Features* von Quarz und Kaolinit dominierte die Modelle. Folglich wurden für die SOC-Modelle die *sD* Kaolinit und Quarz festgelegt. Die Korngröße war als *sD* nur eingeschränkt gerechtfertigt, da der Einfluss des Transparenz-*Features* fehlte. Die den Modellen zugrunde liegenden *sD* bezogen sich somit überwiegend auf die Bodenparameter Sand- und Tongehalt. Aus diesem Grund wurden die SOC-Modelle als nicht opto-physikalisch fundiert bezeichnet, was auch als Ursache für die erhöhte Anzahl an benötigten PLSR-Faktoren gewertet wurde.

Thermale Sensorik – Spektrales Resampling

Die Vorhersageergebnisse auf Grundlage des spektralen *Resamplings* unterstrichen die Robustheit bzw. Stabilität der Textur-Modelle. Dabei zeigte sich, dass die abnehmende spektrale Dimensionalität kaum einen Einfluss auf die Vorhersage der Textur-Parameter hatte. So konnte selbst in den Sand-Modellen mit nur fünf ASTER-Bändern noch immer $\sim 85 \%$ der y-Varianz erklärt werden ($\text{RMSE(X-VAL)} = 1,03 \%$). Auch in der entsprechenden Vorhersage des Tongehaltes wurde 77% der y-Varianz erklärt bei einem RMSE(X-VAL) von $1,0 \%$ – exakt wie in den Modellen der Voll-Auflösung. Hinsichtlich der Entwicklung der y-Varianzen und den Unterschieden zwischen Kalibrierung und Validierung, wurden die Modelle mit abnehmender spektraler Dimensionalität sogar noch robuster.

Der Grund für die überzeugend gute Performanz der Sand- und Ton-Modelle, auf multispektraler Basis, lag zum einen im reduzierten X-Datenraum selbst, der durch seine geringere Dimensionalität auch einfacher zu modellieren war. Entscheidend war dabei, dass der reduzierte X-Datenraum alle relevanten spektralen Informationen für die Quantifizierung des Sand- und des Tongehaltes abdeckte. Dies wurde durch die Interpretation der *Rk* aus den PLSR-Modellen bestätigt. Es zeigte sich, dass die wichtigsten Merkmale der *sD*, die für die Voll-Auflösung bereits identifiziert und als opto-physikalisch fundiert bewertet wurden, bis hin zur ASTER-Auflösung mit nur fünf Bändern erhalten blieben. Die *Rk* der ASTER-Modelle signalisierten dabei die Bedeutung der Bänder B13 und B14 für die Vorhersage der Textur-Parameter, welche mit der spektralen Dynamik im Einflussbereich des Transparenz-*Features* erklärt wurde. Der zusätzliche HypsIRI-Kanal bei $\sim 12 \mu\text{m}$ konnte für die Vorhersagen keine überzeugende Verbesserung liefern. Der Korngrößen-Index nach Salisbury und D’Aria (1992b) eignete sich nicht für eine Quantifizierung der Bodenproben aus Mullewa.

Während sich die Reduktion der spektralen Bänder auf die Vorhersage der Textur-Parameter kaum oder sogar positiv auswirkte, litt die Performanz der SOC-Modelle darunter merklich. Die multispektrale Auflösung reichte nicht mehr aus, um den y-Datenraum (SOC-Gehalt) ausreichend zu erklären und um robuste Modelle aufbauen zu können. Als Ursache wurde in der Interpretation der *Rk* die einseitige Verteilung der wichtigsten spektralen Einflüsse in den multispektralen Modellen auf nur zwei ASTER-Bänder (B10 und B11) innerhalb des ersten Quarzflügels (bis $\sim 8,63 \mu\text{m}$) ausgemacht. Die relativ schmalen spektralen Merkmale im Wellenlängenbereich ab $\sim 9 \mu\text{m}$ ließen sich in den multispektralen SOC-Modellen nicht mehr auflösen und somit tru-

gen die ASTER-Bänder B12, B13 und B14 keine relevante spektrale Information mehr für die Vorhersage des SOC-Gehaltes bei.

Vergleich mit der solar-reflektiven Sensorik

Der Vergleich mit den Ergebnissen der Messungen auf Grundlage der solar-reflektiven Sensorik zeigte deutlich die Überlegenheit der thermalen Messungen für die Vorhersage der Textur-Parameter (Sand- und Tongehalt). Die Quantifizierung dieser Bodenparameter aus den Messungen der solar-reflektiven Sensorik verlangte dafür mehr als doppelt so viele PLSR-Faktoren (7 für den Sand- und 9 für den Tongehalt). Aus diesem Grund wurden die *VNIR-SWIR*-Modelle als relativ komplex bezeichnet. Neben der Komplexität fiel vor allem der verhältnismäßig geringe Anteil an der y-Varianz auf, den die *VNIR-SWIR*-Modelle in der Lage waren zu erklären (69 % im Sand- und 65 % im Ton-Modell). Der Vorhersagefehler war in den *VNIR-SWIR*-Modellen um ~ 50 % höher als in den *LWIR*-Modellen und wäre bei vergleichbar geringer Faktorenzahl noch sehr viel höher ausgefallen.

Die Vorhersage des SOC-Gehaltes aus den solar-reflektiven Messungen führte dagegen zu ähnlichen Resultaten wie aus den thermalen Messungen. Mit drei zusätzlichen Faktoren konnte bei 68 % fast das Niveau der erklärten y-Varianz aus den thermalen Modellen (71 %) erreicht werden. Dennoch war das thermale Infrarot auch hier, wenn auch weniger deutlich, überlegen.

Alle Modelle aus den Messungen der solar-reflektiven Sensorik zeigten ihre höhere Sensibilität in der ungleichmäßigen Entwicklung der y-Varianzen sowie in den deutlich größeren Unterschieden zwischen der Kalibrierung und der Validierung. Die Vorhersage auf Grundlage der solar-reflektiven Messungen konnte für keinen der drei Bodenparameter mit ähnlich robusten Modellen realisiert werden, wie es mit der thermalen Sensorik möglich war. Das spektrale *Resampling* der ASD-Spektren auf die HyMap-Spezifikation hatte auf die Ergebnisse der PLSR kaum einen Einfluss.

Aus der Interpretation der *Rk* gingen für die *VNIR-SWIR*-Modelle die *sD* Kaolinit, Goethit und Hämatit für alle drei Bodenparameter hervor. Die *VNIR-SWIR*-Modelle wurden als nicht ausreichend opto-physikalisch fundiert bewertet, da außer dem spektralen Einfluss des Minerals Kaolinit keine weiteren direkten Zusammenhänge mit den untersuchten Bodenparametern hergestellt werden konnten. Mögliche indirekte Zusammenhänge für die Korngröße (*coatings* – spezifische Kornoberfläche) wurden aufgezeigt.

Für die Modelle der Textur-Parameter wurden zusätzlich die *W-loadings* der einzelnen Faktoren aus den Modellen interpretiert, um die Ursachen für die Komplexität und Sensibilität der Modelle noch besser beleuchten zu können. Dabei zeigte sich, dass die PLSR-Modelle in erster Linie den *VNIR* bis $\sim 1,3 \mu\text{m}$ für die Modellierung der Textur-Parameter bevorzugten. Dieser Bereich wurde von den hohen spektralen Kontrasten bestimmt, welchen die Eisenoxide/-hydroxide Hämatit und Goethit hier erzeugten. *sD*, welche in einem textur-relevanten Zusammenhang standen, wurden von den Modellen unterbewertet. Versuche, die Vorhersage vor diesem Hintergrund auf den *SWIR* $> 1,3 \mu\text{m}$ zu beschränken, brachten keine Verbesserung. Für den SOC-Gehalt konnte gezeigt werden, dass der *VNIR* zu dessen Vorhersage keinen entscheidenden Beitrag leistete. Mithilfe einer Variablenselektion (*jack-knifing*-Verfahren) konnte die Vorhersage des Sand- und des SOC-Gehaltes optimiert werden.

Quantifizierung des Geo-Chemismus

Die Quantifizierung des Geo-Chemismus mittels der fünf *LWIR* ASTER-K채nalen war f체r einen erheblichen Teil der Elemente/Oxide (10 von 22) erfolgreich. Im Rahmen dieser Arbeit wurden nur die Vorhersageergebnisse des Siliciumdioxid (SiO_2)- und des Aluminiumoxid (Al_2O_3)-Gehaltes vorgestellt, welche die mineralogische Grundlage der untersuchten Textur-Parameter (Sand- und Tongehalt) bildeten. Auf dieser spektralen Grundlage konnte der SiO_2 -Gehalt bei vier Faktoren mit einem RMSE(X-VAL) von 2,13 % vorhergesagt werden. Dabei konnten 93 % der y-Varianz erkl채rt werden. Der Gehalt an Al_2O_3 wurde mit einem RMSE(X-VAL) von 0,84 % vorhergesagt, wobei das ein-faktorige Modell 84 % der y-Varianz erkl채ren konnte. Beide Modelle zeichneten sich durch eine hohe Robustheit aus. Mithilfe der *Rk* entsprechender PLSR-Modelle aus einer erweiterten Voll-Aufl鵹sung (7,5 bis 15,0 μm) wurde der kausale Zusammenhang zwischen den vom Modell bevorzugten spektralen Merkmalen und der zugrunde liegenden Mineralogie noch einmal verdeutlicht.

Kapitel 8

Diskussion der Ergebnisse mit Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde die Möglichkeit einer Nutzung thermal-infraroter Wellenlängen zur Erfassung/Quantifizierung von Bodenparametern vorgestellt, wie sie sich auf den Agrarflächen des semiariden Untersuchungsgebietes Mullewa in West-Australien darstellen. Das Potential des thermalen Spektralbereichs wurde für die Vorhersage des Ton- und Sandgehaltes sowie des Gehaltes an organischem Kohlenstoff untersucht. Auf Grundlage der thermalen Laborspektroskopie wurde für den Wellenlängenbereich des *LWIR* (8 – 14 μm) gezeigt, dass die spektralen Voraussetzungen für künftige fernerkundliche Anwendungen auf diesem Gebiet gegeben sind. Dabei wurde insbesondere für die Erfassung/Quantifizierung der Textur-Parameter (Sand- und Tongehalt) demonstriert, dass deren spektrales Potential im *LWIR*, das des herkömmlich gebrauchten solar-reflektiven Bereichs (*VNIR-SWIR*) deutlich übertrifft. Die vorgestellten Ergebnisse zur quantitativen Modellierung unterstreichen die Überlegenheit des *LWIR* gegenüber dem *VNIR-SWIR*. Die Möglichkeiten, die das *LWIR* für die Fragestellung bietet, zeigten sich besonders eindrucksvoll bei der Reduktion der Wellenlängen auf die spektralen Spezifikationen flugzeug- und satellitengetragener Sensoren. Im Einzelnen ergaben sich in dieser Arbeit die folgenden wesentlichen Resultate sowie Problemfelder:

- In der Vorhersage der Bodenparameter zeigte sich die Überlegenheit des *LWIR* gegenüber dem *VNIR-SWIR* an sehr robusten PLSR-Modellen, die mit vergleichsweise wenigen Faktoren in der Lage waren, einen relativ großen Anteil der y-Varianzen zu erklären und zudem geringere Vorhersagefehler aufwiesen. Diese Überlegenheit zeigte sich für den SOC-Gehalt weniger drastisch als für die Textur-Parameter (Sand- und Tongehalt).
- Die erweiterten Möglichkeiten im *LWIR* basierten in erster Linie auf dessen höherem spektralen Informationsgehalt für die Erfassung/Quantifizierung der Textur-Parameter. Die typischen pedologischen und mineralogischen Eigenschaften der semiariden Böden zeigten sich im *LWIR* in einer größeren spektralen Vielfalt. Dazu zählten insbesondere die spektralen Merkmale von Quarz, mit der charakteristischen ε -Doppelbande zwischen 8 und 9,5 μm und dem ε -Max bei 8,63 μm , sowie mindestens vier distinktiven spektralen Merkmalen von Kaolinit (9,0 μm , 9,8 μm , 10,5 μm und 10,95 μm). Die Bodenspektren des *LWIR* zeigten darüber hinaus ein diagnostisches spektrales Verhalten in Abhängigkeit von der Korngröße, welches sich einerseits in einer Reduktion des spektralen Kontrastes in den Reststrahlenbändern (*RB*) bei abnehmender Korngröße ausdrückte. Andererseits wurde beobachtet, dass, als Folge der Volumenstreuung, mit abnehmender Korngröße der Einfluss des Transparenz-*Features* zunahm. Dies beeinflusste die spektrale Dynamik ab $\sim 9,8 \mu\text{m}$ und die *sF* in diesem Wellenlängenbereich wurden korngrößenabhängig modifizierte. Die für die Sand- und Ton-Modelle identifizierten spektralen *Driver* (Quarz, Kaolinit und Korngröße) standen mit den quantifizierten Bodenparametern in direktem Zusammenhang. Entsprechende spektrale Merkmale waren im *VNIR-SWIR* dagegen vergleichsweise monoton oder nicht vorhanden.

- Die charakteristischen eisenhaltigen Minerale semiarider Böden, Hämatit und Goethit, hatten einen enormen spektralen Einfluss auf die Bodenspektren im *VNIR* bis $\sim 1,3 \mu\text{m}$. Der hohe spektrale Kontrast, den diese Minerale dort erzeugten, führte dazu, dass die PLSR-Modelle diese Wellenlängen für die Modellierung der Textur-Parameter bevorzugt wählten. Der Bereich des *SWIR*, wo dagegen ein textur-relevantes spektrales Merkmal vorhanden war (von Kaolinit bei $2,2 \mu\text{m}$), wurde in den Modellen unterbewertet. Aufgrund unzureichender direkter Zusammenhänge zwischen den identifizierten spektralen *Drivern* (Hämatit, Goethit und Kaolinit) und den quantifizierten Bodenparametern, konnten auf Grundlage des *VNIR-SWIR* nur vergleichsweise komplexe Modelle erzeugt werden.
- Im spektralen *Resampling* zeigte sich, dass eine Quantifizierung des Sand- und des Tongehaltes auch mittels multispektraler ASTER-Auflösung, ohne merkliche qualitative Einbußen für die Vorhersage, realisiert werden konnte. Der reduzierte spektrale Datenraum deckte alle relevanten spektralen Informationen für die Quantifizierung ab. Für die SOC-Modelle dagegen reichte die multispektrale Auflösung nicht mehr aus, um robuste Modelle aufzubauen.
- Für den SOC-Gehalt konnten weder im *VNIR-SWIR* noch im *LWIR* diagnostische spektrale Merkmale identifiziert werden. In keinem der Vorhersagemodelle konnten spektrale *Driver* identifiziert werden, die mit dem SOC-Gehalt in einem direkten Zusammenhang standen. Nur die hyperspektralen Modelle waren in der Lage die Hintergründe dieser komplexen Beziehungen für eine erfolgreiche Quantifizierung abzubilden. Ferner zeigte sich, dass der *VNIR* zu dessen Vorhersage keinen entscheidenden Beitrag leistete.
- Die PLSR-Modelle zur Vorhersage des Geo-Chemismus aus der *XRF*-Analyse mittels der fünf ASTER-Bänder unterstrich die optimale Lage dieser *LWIR*-Bänder für eine erfolgreiche Quantifizierung der Mineralogie von Böden semiarider Gebiete. Außerdem bestätigte sich in der spektralen Interpretation der Modelle die den spektralen *Drivern* der Textur-Parametern (Quarz, Kaolinit, und Korngröße) zugrunde liegende Mineralogie (SiO_2 und Al_2O_3).
- Anhand der Quarz-Referenzsande ($>99,5 \text{ \% SiO}_2$) wurde die Übertragbarkeit zwischen den verwendeten thermalen Sensoren (ϵ -FTIR-Spektroskopie und DHR-FTIR-Spektroskopie) sowie zwischen den Algorithmen zur Temperatur-Emissivitäts-Trennung (*TES*) grundsätzlich bestätigt.
- Größere Abweichungen wurden in den Bodenspektren der ϵ -FTIR-Spektroskopie im Bereich der Christiansen-Frequenz-*Feature* (*CFF*) beobachtet. Hierbei zeigten sich die Schwierigkeiten, mit welchen die ϵ -FTIR-Spektroskopie und damit eine künftige thermale Fernerkundung beim Messen von Materialgemischen zwangsläufig konfrontiert werden wird. Mit der Abnahme des spektralen Einflusses von SiO_2 (abnehmender Sandgehalt und zunehmender Einfluss von Tonmineralen und/oder organischer Substanz) entfernte sich die in den *TES*-Algorithmen getroffene Annahme ($\epsilon_{\text{max}} = 1.0$), wegen der steigenden Reflektanzwerte an den *CFF*, sukzessive von ihrer Gültigkeit. Daraus begründen sich erweiterte Anforderungen an die Algorithmen der *TES*, die vor allem dann an Bedeutung gewinnen, wenn die Übertragbarkeit bei Verwendung unterschiedlicher Sensoren im Vordergrund steht. Die Herausforderung liegt dann darin, ϵ_{max} individuell der „wahren“ Mineralogie der Böden anzunähern.

Diese Grundlagenstudie zeigt erstmals die erweiterten Möglichkeiten, die sich aus der Nutzung des *LWIR* für die Erfassung/Quantifizierung von Bodenparametern in semiariden Gebieten ergeben. Die Gegenüberstellung mit den Ergebnissen aus dem *VNIR-SWIR* sowie die Untersuchungen zum spektralen *Resampling* werden der Entwicklung zukünftiger *Monitoring*-Ansätze dienen, die das Ziel haben, die Dynamik von Bodenoberflächen in semiariden Naturräumen quantitativ zu analysieren. Die hier untersuchten Bodenparameter steuern maßgeblich die Oberflächenstabilität der Böden und sind damit für die Einschätzung des Erosionspotentials durch Wind wichtige Einflussgrößen. Die demonstrierte präzise quantitative Ableitung dieser Bodenparameter aus dem *LWIR*, verweist auf die Möglichkeiten, die ein thermales Fernerkundungs-System bieten würde, um Veränderungen der Bodenoberflächen bezüglich ihrer Korngrößenzusammensetzung oder ihres Gehaltes an organischem Kohlenstoff zu beobachten. Für Erosionsmodelle könnten dadurch, großflächig und regelmäßig, unverzichtbare Eingangsgrößen bereitgestellt werden. Weitere Einflussgrößen in diesem Zusammenhang, die in dieser Arbeit nicht berücksichtigt wurden, sind die Bodenfeuchte sowie die Oberflächenrauigkeit. Deren spektrale Beschreibung im *LWIR* sowie deren spektraler Einfluss auf die Vorhersagemodelle wird Gegenstand weiterer Forschung sein.

Übertragbarkeit der Vorhersage auf Fernerkundungsdaten

Die Grundlagenstudie auf Basis der Laborspektroskopie ruft unweigerlich die Frage nach der Übertragbarkeit der Ergebnisse auf eine Vorhersage aus Fernerkundungsdaten hervor. Grundsätzlich muss eine fundierte Prüfung auf Übertragbarkeit Gegenstand weiterer Untersuchungen werden. Trotzdem soll an dieser Stelle eine Einschätzung dahingehend versucht werden.

Sowohl die Emissions-FTIR-Spektroskopie als auch die DHR-FTIR-Spektroskopie erfüllen bezüglich des Messaufbaus die Voraussetzungen, die ein quantitativer Vergleich mit Emissionsspektren aus Fernerkundungs-Sensoren verlangt (Salisbury et al., 1991; Salisbury und D’Aria, 1992a; Hecker et al., 2011). Außerdem wurde darauf geachtet, dass in die PLSR-Modellierung nur Bänder eingingen, die sich innerhalb der atmosphärischen Fenster befinden und somit in einer fernerkundlichen Anwendungen zur Verfügung stehen. Die eingesetzte Emissions-FTIR-Spektroskopie repräsentierte zudem die Methode der passiven thermalen Sensorik, die auch bei einer fernerkundlichen Messung zum Einsatz kommt. Dabei führt die passiv gemessene Strahldichte der Bodenoberfläche – als eine Funktion sowohl der kinetischen Temperatur als auch der Emissivität – zwangsläufig zu einem unterbestimmten Gleichungssystem, dessen Lösung grundsätzlich mittels einer Temperatur-Emissivitäts-Trennung (*TES*) nachgekommen wird. Für die Emissions-FTIR-Spektroskopie wurden hier bereits zwei *TES*-Algorithmen vorgestellt (MAXSPEC-Methode (Salvaggio und Miller, 2001a) und die *Blackbody-Fit*-Methode (Kahle und Alley, 1992)). Bei Feldmessungen wird für gewöhnlich die *spectral smoothness*-Methode nach Horton et al. (1998) bevorzugt, welche die Oberflächentemperatur bzw. die Emissivität über eine Minimierung der reflektierten atmosphärischen Emissionslinien im Spektrum bestimmt.

Diese in der Emissions-FTIR-Spektroskopie angewandten *TES*-Algorithmen verlangen jedoch stets eine Messung der reflektierte Hintergrundstrahlung (*DWR*, engl. downwelling radiance). Außerdem wird vorausgesetzt, dass der Abstand zwischen Sensor und Probe ausreichend klein ist und somit der verbleibende atmosphärische Einfluss vernachlässigbar wird. Für thermale Fernerkundungsdaten stehen im Allgemeinen keine Messungen der *DWR* zur Verfügung. Außerdem müsste die Abschwächung der Pixel-Information durch den Einfluss der Atmosphäre berücksichtigt werden.

Methoden zur Korrektur der atmosphärischen Effekte aus thermalen hyperspektralen Bilddaten existieren, befinden sich jedoch noch in einem Entwicklungsstadium. Neben Strahlungstransfermodellen (wie etwa in ATCOR[®]4 – www.rese.ch), die verschiedene meteorologische und solar-geometrische Input-Parameter verlangen, stellen Johnson (1998), Young (1998) und Young et al. (2002) eine *in-scene atmospheric compensation* (ISAC) Methode vor, die sich für die atmosphärische Korrektur ausschließlich aus den Bilddaten selbst bedient. Der Vorteil der Methode, auf keine Zusatzdaten zurückgreifen zu müssen, wird von dem Nachteil überschattet, dass keine Korrektur der *DWR* berücksichtigt werden kann. Die atmosphärisch korrigierten Daten enthalten daher neben der vom Objekt/Pixel selbst emittierten Strahlung noch die *DWR*, welche den spektralen Kontrast in den Spektren abschwächt (vgl. *apparent emissivity*). Für thermale hyperspektrale Bilddaten werden meist *TES*-Algorithmen verwendet, welche die Pixeltemperatur über die höchste Strahlungstemperatur (dabei wird eine konstante ϵ angenommen) im Spektrum bestimmt, die dann für die Berechnung der Emissivität als Funktion der Wellenlänge verwendet wird. Hecker (2012) zeigte am Beispiel von SEBASS-Daten verschiedene Schwachpunkte dieses Ansatzes auf und betonte dabei die Notwendigkeit einer vorhergehenden Pixel-Selektion.

Erste Untersuchungen mit dem Ziel, die Laborspektren aus dem ASTER-*Resampling* mit ASTER-Satellitendaten zu vergleichen (die im gleichen Zeitraum über dem Untersuchungsgebiet Mullewa aufgezeichnet wurden), zeigten überwiegend vielversprechende spektrale Übereinstimmungen. Dabei wurden aus den ASTER-Emissivitäten drei mal drei Pixel (270 mal 270 Meter) um den jeweiligen Standort extrahiert und zu einem Spektrum gemittelt. Für die großflächigen und weitgehend homogenen Äcker in Mullewa, mit durchschnittlichen Größen von 1000 mal 1000 Metern, scheint die relativ kleine geometrische Auflösung des Satelliten angemessen zu sein.

Einfluss von trockener Vegetation (Zellulose)

Größere spektrale Abweichungen in den ASTER-Daten wurden vor allem in Gebieten beobachtet, in denen vermehrt Ernterückstände (Getreidestoppel) vorhanden waren. Mithilfe der HyMAP-Bilddaten konnte anhand der Zellulosebande bei $2,08 \mu\text{m}$ die Lage dieser Gebiete bestätigt werden. Der spektrale Einfluss von Getreidestoppeln (bzw. von Zellulose), welcher als Folge der konservierenden Bodenbearbeitung (engl. *conservation tillage*) während der Brachzeit zum typischen Erscheinungsbild von Ackerflächen in vergleichbaren winderosionsanfälligen Untersuchungsgebieten gehört, muss bei der Entwicklung zukünftiger *Monitoring*-Ansätze berücksichtigt werden. Im solar-reflektiven Bereich wird der spektrale Einfluss von Zellulose, neben den bereits beschriebenen Nachteilen des *VNIR-SWIR* bezüglich semiarider Bodenoberflächen, mit dafür verantwortlich gemacht, dass eine Quantifizierung auf Grundlage der HyMap-Daten nicht zufriedenstellend realisiert werden konnte (diese Ergebnisse sind nicht Gegenstand dieser Arbeit). Die Vorhersage der Textur-Parameter, Sand- und Tongehalt, im *VNIR-SWIR*, die hier entscheidend von dem einzigen textur-relevanten spektralen Merkmal von Kaolinit bei $\sim 2,2 \mu\text{m}$ abhängig ist, kann durch den Einfluss der Zellulosebande bei $2,08 \mu\text{m}$ merklich gestört werden (Rodgers und Cudahy, 2009).

Hier verspricht ein hyperspektrales *LWIR*-System, wegen des großen spektralen Potentials bei der Detektion semiarider Bodenparameter, mehr Möglichkeiten. Außerdem geben weitere Laboruntersuchungen diesbezüglich Hoffnung, in denen der Einfluss der Zellulose auf die Bodenproben im thermalen Wellenlängenbereich analysiert wurde. Erste Resultate deuten darauf hin, dass mit einem hyperspektralen thermalen Fernerkundungs-System, selbst bei großem Einfluss von Zellulose, ausreichend spektrale Informationen der Bodenparameter erhalten bleiben.

Monitoring von Bodenoberflächen unter Feldbedingungen

Im Hinblick auf die Übertragbarkeit von Labor- auf Feld-Bodenspektren verweisen Salisbury et al. (1994) und Johnson et al. (1998) auf die veränderten spektralen Signaturen im *LWIR*, die sich bei der Beprobung, als Folge der Zerstörung der Bodenoberfläche bzw. dem Transport der Probe, ergeben können. Die ungestörte Bodenoberfläche, deren Spektrum nur im Feld in ihrem „sauberen“ Zustand (*clean soils*) aufgezeichnet werden kann, wird demnach bei der Beprobung „verschmutzt“ (*dirty soils*), indem die größeren Bodenkörner von sehr feinen Partikeln umhüllt werden. Dadurch wird der spektrale Kontrast im Spektrum reduziert. Feldmessungen (mittels μ FTIR-Spektrometer) von ungestörten Bodenoberflächen wurden bei einer Feldkampagne 2011 – ungefähr ein Jahr nach der Beprobung – für einige wenige Standorte im Untersuchungsgebiet durchgeführt. Auf Grundlage der Daten konnte diese These für natürliche Bodenoberflächen grundsätzlich bestätigt werden. Besonders deutlich zeigte sich der Effekt bei Oberflächenkrusten tonreicher Böden. Es wird vermutet, dass diese Bodenkrusten durch Regen und Wind „gesäubert“ wurden und somit kaum noch feine Bodenpartikel oberflächlich vorhanden waren (*clean soils*). Durch die Beprobung wurde diese präparierte, dünne Oberfläche zerstört und die feinen Tonpartikel gewannen durch den mechanischen Eingriff (Durchmischung) wieder an spektralem Einfluss (*dirty soils*).

Dieser Effekt konnte dagegen für die Oberflächen der landwirtschaftlich genutzten Böden nicht beobachtet werden. Die Unterschiede im spektralen Kontrast zwischen den Feld- und Laborspektren waren hierbei nur sehr gering. Grund ist vermutlich die Tatsache, dass diese Oberflächen durch den landwirtschaftlichen Eingriff oft mechanisch beansprucht werden (selbst wenn die praktizierte konservierende Bodenbearbeitung versucht, diese Eingriffe minimal zu halten) und dadurch nicht die Möglichkeit haben, sich oberflächlich in ausreichendem Maße zu sortieren. Vor diesem Hintergrund sollte der Reduktions-Effekt einer Vorhersage von Bodenparametern auf Agrarflächen, auf Grundlage des *LWIR*, nichts im Wege stehen. (Durch die landwirtschaftliche Bodenbearbeitung könnte sich allerdings die damit einhergehende Kompaktion der Oberfläche spektral auswirken (Wald und Salisbury, 1995)).

Im Rahmen eines Erosions-Monitorings könnte diesem Zusammenhang allerdings wieder Bedeutung zukommen. Informationen zur Verteilung von Bodenkrusten – insbesondere zu deren partiellen Zerstörung (z.B.: durch Viehtritt) – stellen dafür wichtige Eingangsgrößen dar. Der Zustand von Bodenkrusten fließt generell in die Bewertung von Ökosystemen ein, um sie hinsichtlich ihrer Anfälligkeit für Erosionsprozesse einschätzen zu können. Dies praktizieren auch Tongway und Hindley (2004) in ihrer weitverbreiteten *land-function-analyses* (LFA). Der Reduktions-Effekt im spektralen Kontrast könnte bei einer Detektion im *LWIR* die Trennung zwischen intakten und beschädigten Bodenkrusten möglich machen.

Alle in dieser Arbeit diskutierten spektralen Daten (aus Labor- und Feldspektroskopie sowie aus der HyMap-Befliegung und der ASTER-Aufnahme) basierten auf getrockneten Bodenproben bzw. Bodenoberflächen, die sich in einem ausgetrockneten Zustand befanden. Für die Brachzeit, innerhalb derer eine fernerkundliche Anwendung aufgrund der freiliegenden Böden sinnvoll erscheint, sind trockene Bodenverhältnisse wegen des semiariden Klimas (warme bis heiße, trockene Sommer) typisch. Auftauchende Bodenfeuchte (z.B. durch selten Niederschläge oder Kondensationsfeuchte bei nächtlichen Thermal-Befliegungen) würde den spektralen Kontrast der *LWIR*-Bodenspektren abschwächen. Thermale Befliegungsdaten müssten in diesem Fall dahingehend korrigiert werden. Die dafür notwendigen quantitativen Beziehungen zwischen dem prozentualen Wassergehalt und dessen spektraler Einfluss auf die spektralen Signaturen der Böden sollten Gegenstand weitere Untersuchungen sein.

Die Schluff-Fraktion (2–20 μm) wurde in der Quantifizierung nicht berücksichtigt, da sie einerseits als der komplementäre Teil zur Summe aus Sand- und Ton-Fraktion, leicht bestimmt werden kann, andererseits besitzt die Schluff-Fraktion keine eindeutigen mineralogischen sD , wie etwa die Sand- oder die Ton-Fraktion (Quarz oder Tonminerale). Die Schluff-Fraktion ist vielmehr eine mineralogische Mischung aus beiden. Versuche einer Modellierung der Schluff-Fraktion mittels PLSR wurden dadurch erheblich gestört. Die korngrößenabhängigen spektralen Merkmale der Schluff-Fraktion alleine werden für eine quantitative Modellierung als nicht ausreichend bewertet.

Literaturverzeichnis

- Albertz, J.: *Einführung in die Fernerkundung. Grundlagen der Interpretation von Luft- und Satellitenbildern*. Wiss. Buchges., Darmstadt, 2001.
- Baldrige, A. M., Hook, S.J., Grove, C. I. und Rivera, G.: The aster spectral library version 2.0. In: *Remote Sensing Environment*, Band 113:S. 711–715, 2009.
- Bartholomeus, H., Epema, G. und Schaepman, M.: Determining iron content in mediterranean soils in partly vegetated areas, using spectral reflectance and imaging spectroscopy. In: *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation*, Band 9:S. 194–203, 2007.
- Baumgardner, M.F., Silva, L.F., Biehl, L.L. und Stoner, E.R.: Reflectance properties of soil. In: *Adv. Agron.*, Band 38:S. 2–44, 1985.
- Ben-Dor, E. und Banin, A.: Near-infrared analysis as a rapid method to simultaneously evaluate several soil properties. In: *Soil Science Society of America Journal*, Band 59:S. 364–372, 1995.
- Ben-Dor, E., Inbar, Y. und Chen, Y.: The reflectance spectra of organic matter in the visible near-infrared and short wave infrared region (400–2500 nm) during a controlled decomposition process. In: *Remote Sensing Environment*, Band 61:S. 1–15, 1997.
- Ben-Dor, E., Irons, J. R. und Epema, G.F.: Soil reflectance. In: Rencz, Andrew N. (Hg.) *Remote Sensing for the Earth Sciences: Manual of Remote Sensing*, John Wiley & Sons, Inc., Band 3, S. 111–188. 1999.
- Ben-Dor, E., Taylor, R.G., Hill, J., Dematte, J.A.M., Whiting, M.L., Chabrilat, S. und Sommer, S.: imaging spectrometry for soil applications. In: *Advances in Agronomy*, Band 97:S. 321–392, 2008.
- Bornemann, L., Welp, G. und Amelung, W.: Particulate organic matter at the field scale: Rapid acquisition using mid-infrared spectroscopy. In: *Soil Science Society of America Journal*, Band 74(4):S. 1147–1156, 2010.
- Bornemann, L., Welp, G., Brodowski, S., Rodionov, A. und Amelung, W.: Rapid assessment of black carbon in soil organic matter using mid-infrared spectroscopy. In: *Organic Geochemistry*, Band 39(11):S. 1537–1544, 2008.
- Brady, Nyle C, Weil, Ray R et al.: *The nature and properties of soils*. Ed. 11. Prentice-Hall Inc., 1996.
- Chabrilat, S., Goetz, A.F.H., Krosley, L. und Olsen, H.W.: Use of hyperspectral images in the identification and mapping of expansive clay soils and the role of spatial resolution. In: *Remote Sensing Environment*, Band 82:S. 431–445, 2002.
- Chang, C., Laird, D.A., Mausbach, M.J. und Hurburgh, C.R.: Near-infrared reflectance spectroscopy - principal components regression analyses of soil properties. In: *Soil Science Society of America Journal*, Band 65:S. 480–490, 2001.

- Chappell, A., Zobeck, T.M. und Brunner, G.: Using bi-directional soil spectral reflectance to model soil surface changes induced by rainfall and wind-tunnel abrasion. In: *Remote Sensing of Environment*, Band 102:S. 328–343, 2006.
- Clark, R. N.: Spectroscopy of rocks and minerals and principles of spectroscopy. In: John Wiley & Sons, Inc. (Hg.) *Remote Sensing for the Earth Sciences: Manual of Remote Sensing*, John Wiley & Sons, Inc., Band 3. 1999.
- Clark, R. N., Swayze, G.A., Wise, R., Livo, E., Hoefen, T., Kokaly, R. und Sutley, S.J.: Usgs digital spectral library splib06a. In: *U.S. Geological Survey, Digital Data Series 231*, 2007.
- Condit, H.R.: The spectral reflectance of american soils. In: *Photogrammetric Engineering and Remote Sensing*, Band 36:S. 955–966, 1970.
- Cudahy, T. J.: Satellite aster geoscience product notes for australia. Technischer Bericht EP-30-07-12-44, CSIRO - DIVISION OF EXPLORATION AND MINING, 2012. URL http://c3dmm.csiro.au/Australia_ASTER/Australian%20ASTER%20Geoscience%20Product%20Notes%20FINALx.pdf.
- Cudahy, Thomas John: *Mapping Surface Mineralogy and Scattering Behaviour Using the Mid-infrared Airborne CO₂ Laser Spectrometer (MIRACO₂LAS)*. Dissertation, Curtin University of Technology, Australia, 2000.
- Dalal, R.C. und Henry, R.J.: Simultaneous determination of moisture, organic carbon and total nitrogen by near infrared reflectance spectrophotometry. In: *Soil Science Society of America Journal*, Band 50:S. 120–123, 1986.
- Esbensen, K. H.: *Multivariate Data Analysis in Practice: An Introduction to Multivariate Data Analysis and Experimental Design*. Camo, Oslo, fünfte Auflage, 2006.
- FAO: The state of the world's land and water resources for food and agriculture. In: *Managing systems at risk*. Rome, 2011, FAO Conference document C2011/32.
- FAO: The state and food and agriculture. Technischer Bericht, Food and Agriculture Organization of the United Nations, Rom, 2012.
- Geringhausen, H., G., Menz und Kaufmann, H.: Spatially explicit estimation of clay and organic carbon content in agricultural soils using multi-annual imaging spectroscopy data. In: *Applied and Environmental Soil Science*, 2012. doi:10.1155/2012/868090.
- Gomez, C., Viscarra-Rossel, R. A. und A.B., McBratney: Soil organic carbon prediction by hyperspectral remote sensing and field vis-nir spectroscopy: An australian case study. In: *Geoderma*, Band 146(3-4):S. 403–411, 2008. doi:10.1016/j.geoderma.2008.06.011.
- Government Office for Science: Foresight. The Future of Food and Farming. Final Project Report. Technischer Bericht, The Government Office for Science, London, 2011.
- Greenhagen, B. T. und Paige, D. A.: Mapping lunar surface petrology using the mid-infrared emissivity maximum with the lro diviner radiometer. In: Mackwell, S. und Stansbery, E. (Hg.) *37th Annual Lunar and Planetary Science Conference*. League City, Texas, 2006, Lunar and Planetary Institute Science Conference Abstracts, S. 2406.
- Grove, C. I., Hook, S.J. und Paylor, E. D.: Laboratory reflectance spectra for 160 minerals 0.4 - 2.5 micrometers. Technischer Bericht, Jet Propulsion Laboratory, Pasadena, CA, 1992.

- Haberhauer, G., Rafferty, B., Strebl, F. und Gerzabeck, M.H.: Comparison of the composition of forest soil litter derived from three different sites at various decompositional stages using ftir spectroscopy. In: *Geoderma*, Band 83:S. 331–342, 1998.
- Hapke, Bruce: *Theory of reflectance and emittance spectroscopy*. Cambridge University Press, Cambridge ;New York, erste Auflage, 2005. ISBN 9780521619271.
- Hecker, C.: *Mapping Feldspars from Above - a Thermal Infrared and Partial Least Squares-based Approach*. Dissertation, University of Twente, 2012.
- Hecker, C., Dilles, J.H., van der Meijde, Mark und van der Meer, F.: Thermal infrared spectroscopy and partial least squares regression to determine mineral modes of granitoid rocks. In: *Geochemistry, Geophysics, Geosystems (G3)*, Band 13(3), 2012.
- Hecker, C., Hook, S.J., van der Meijde, M., Bakker, W., van der Werff, H., Wilbrink, H., van Ruitenbeek, F., de Smeth, B. und van der Meer, F.: Thermal infrared spectrometer for earth science remote sensing applications—instrument modifications and measurement procedures. In: *Sensors*, Band 11:S. 10981–10999, 2011.
- Hook, S.J, Abbott, E.A., Grove, C., Kahle, A.B. und Palluconi, F.D.: Multispectral thermal infrared data in geological studies. In: Rencz, Andrew N. (Hg.) *Remote Sensing for the Earth Sciences: Manual of Remote Sensing*, John Wiley & Sons, Inc., Band 3, S. 59–110. 1999.
- Hook, S.J und Kahle, A.B.: The micro fourier transform interferometer (mftir) - a new fieldspectrometer for aquisition of infrared data of natural surfaces. In: *Remote Sensing Environment*, Band 56:S. 172–181, 1996.
- Horton, K.A., Johnson, R.J. und Lucey, P.G.: Infrared measurements of pristine and disturbed soils 2. environmental effects and field data reduction. In: *Remote Sensing of Environment*, Band 64(1):S. 47–52, 1998. doi:10.1016/S0034-4257(97)00167-3.
- Hulley, G. und Hook, S.J.: Hypsiri level-2 thermal infrared (tir) land surface temperature and emissivity algorithm theoretical basis document. Technischer Bericht 11-5, JPL and NASA, Jet Propulsion Laboratory California Institute of Technology Pasadena, California, 2011.
- Hunt, G. R.: Electromagnetic radiation: The communication link in remote sensing. In: Siegel, B. S. und Gillespie, A. R. (Hg.) *Remote Sensing in Geology*, Wiley, New York, NY, Kapitel 2, S. 5–45. 1980.
- Hunt, G. R. und Salisbury, J.W.: Visible and near-infrared spectra of minerals and rocks: I. silicate minerals. In: *Modern Geol.*, Band 1:S. 283–300, 1970.
- Hunt, G. R. und Salisbury, J.W.: Visible and near-infrared spectra of minerals and rocks: Ii. carbonates. In: *Modern Geol.*, Band 2:S. 23–30, 1971.
- Hunt, G. R., Salisbury, J.W. und Lenhoff, C.J.: Visible and near-infrared spectra of minerals and rocks: Iii. oxides and hydroxides. In: *Modern Geol.*, Band 2:S. 195–205, 1971.
- Irons, J. R., Campbell, G. S., Norman, J. M., Graham, D. W. und Kovalick, W. M.: Prediction and measurement of soil bidirectional reflectance. In: *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, Band 30:S. 249–260, 1992.
- Irons, J. R., Weismiller, Richard A. und W., Petersen Gary: Soil reflectance. In: Asrar, Ghassem (Hg.) *Theory and applications of optical remote sensing*, Wiley-Interscience; 1 edition (July 3, 1989), New York. 1989.

- Isbell, R.F.: *The Australian Soil Classification*. CSIRO Publishing, Melbourne, Australia, 1996.
- Janik, L.J., Merry, R.H. und Skjemstad, J.O.: Can mid infra-red diffuse reflectance analysis replace soil extractions? In: *Australian Journal of Experimental Agriculture*, Band 38(7):S. 681—696, 1998.
- Johnson, B.R.: Inscene atmospheric compensation: Application to sebas data collected at the arm site. part 1 ATR-99(8407)-1, The Aerosp. Corp, El Segundo, Calif., 1998.
- Johnson, R.J., Lucey, P.G., Horton, K.A. und Winter, E.M.: Infrared measurements of pristine and disturbed soils 1. spectral contrast differences between field and laboratory data. In: *Remote Sensing of Environment*, Band 64(1):S. 34–46, 1998. doi:10.1016/S0034-4257(97)00166-1.
- Kahle, A.B. und Alley, R.E.: Separation of temperature and emittance in remotely sensed radiance measurements. In: *Remote Sensing of Environment*, Band 42:S. 107–111, 1992.
- Kessler, W.: *Multivariate Datenanalyse für die Pharma-, Bio- und Prozessanalytik*. Wiley-VCH, Weinheim, 2006.
- Ketelaar, J.A.A. und Van der Elsken, J.: Frequency shifts in the infrared absorption spectrum of complex ions in solid solution. In: *J. Chem. Phys.*, Band 30:S. 336–337, 1959.
- Korb, A.R. und D’Aria, D.M.: Spectral emissivity and temperature retrieval algorithms and software for infrared remote sensing data. In: *Remote Sensing of Environment (in press)*, Band Bitte beachten: Aufsatz ist nie erschienen! Ihre Bestellung wurde abgelegt., 2000.
- Korb, A.R., Salisbury, J.W. und D’Aria, D.M.: Thermal-infrared remote sensing and kirchhoff’s law: 2. field measurements. In: *Journal of Geophysical Research*, Band 104(B7):S. 15,339–15,350, 1999.
- Lillesand, T.M. und Kiefer, R.W.: *Remote Sensing and Image Interpretation*. John Wiley & Sons, Inc., New York, Chichester, third edition Auflage, 1994.
- Martens, H. und Martens, M.: Modified jackknife estimation of parameter uncertainty in bilinear modelling (plsr). In: *Food Quality and Preference*, 1999.
- Martens, H. und Naes, T.: *Multivariate Calibration*. John Wiley & Sons, 1992.
- McCarty, G.W., Reeves III, J. B., Reeves, V.B., Follett, R.F. und Kimble, J.M.: Mid-infrared and near-infrared diffuse reflectance spectroscopy for soil carbon measurement. In: *Soil Science Society of America Journal*, Band 66:S. 640–646, 2002.
- McKenzie, N., Henderson, B. und McDonald, W.: Monitoring soil change. principles and practice for australian conditions. Technical report 18/02, CSIRO Land and Water, Canberra, Australia, 2002.
- McKenzie, N., Jacquier, David, Isbell, Ray und Brown, Katharine: *Australian Soils and Landscapes*. CSIRO PUBLISHING, Collingwood, VIC, Australia, 2004.
- Nash, Douglas B., Salisbury, J.W., Conel, James E., Lucey, Paul G. und Christensens, Philip R.: Evaluation of infrared emission spectroscopy for mapping the moon’s surface composition from lunar orbit. In: *J. Geophys. Res.*, Band 98(E12):S. 23535–23552, 1993. doi:10.1029/93JE02604.
- Nguyen, T.T., Janik, L.J. und Raupach, M.: Diffuse reflectance infrared fourier transform (drift) spectroscopy in soil studies. In: *Australian Journal of Soil Research*, Band 29:S. 49–67, 1991.

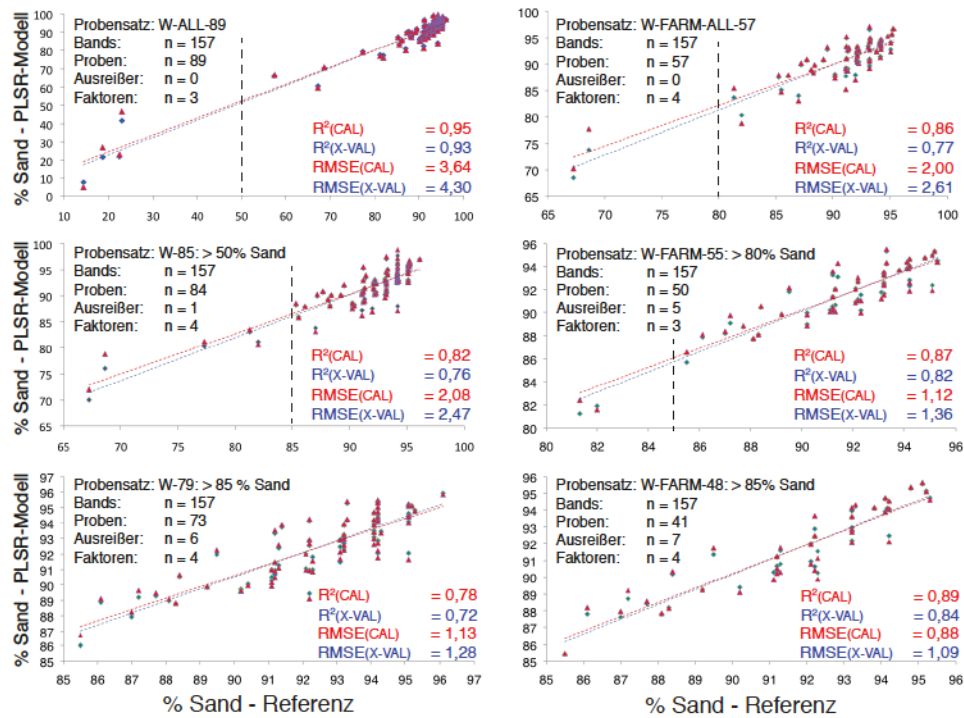
- Nicodemus, F. E.: Directional reflectance and emissivity of an opaque surface. In: *Applied Optics*, Band 4(7):S. 767–773, 1965.
- Niemeyer, J., Chen, Y. und Bollag, J. M.: Characterization of humic acids, composts, and peat by diffuse reflectance fourier-transform infrared spectroscopy. In: *Soil Science Society of America Journal*, Band 56:S. 135–140, 1992.
- Richter, N., Jarmer, T., Chabrilat, S., Oyonarte, C., Hostert, P. und Kaufmann, H.: Free iron oxide determination in mediterranean soil using diffuse reflectance spectroscopy. In: *Soil Science Society of America Journal*, Band 73(1):S. 72–81, 2009.
- Rodgers, A. und Cudahy, Thomas John: Vegetation corrected continuum depths at 2.20 μm : An approach for hyperspectral sensors. In: *Remote Sensing of Environment*, Band 113:S. 2243–2257, 2009.
- Rogers, L.G.: Geraldton region: Land resources survey. In: Wilson, G. (Hg.) *Land Resources Series*, Departement of Agriculture Western Australia, Perth, WA, 13. 1996.
- Rumpel, C., Janik, L.J., Skjemstad, J.O. und Kogel-Knabner, I.: Quantification of carbon derived from lignite in soils using mid-infrared spectroscopy and partial least squares. In: *Org. Geochem.*, Band 32:S. 831–839, 2001.
- Salisbury, J.W.: Spectral measurements field guide. Technischer Bericht ADA362372, Defense Technology Information Center, 1998.
- Salisbury, J.W. und D’Aria, D.M.: Emissivity of terrestrial materials in the 8-14 μm atmospheric window. In: *Remote Sensing Environment*, Band 42:S. 83–106, 1992a.
- Salisbury, J.W. und D’Aria, D.M.: Infrared (8 – 14 μm) remote sensing of soil particle size. In: *Remote Sensing of Environment*, Band 42:S. 157–165, 1992b.
- Salisbury, J.W., Hapke, Bruce und Eastes, J.W.: Usefulness of weak bands in midinfrared remote sensing of particulate planetary surfaces. In: *Journal of Geophysical Research*, Band 92(B1):S. 702–710, 1987.
- Salisbury, J.W., Wald, A. und D’Aria, D.M.: Thermal-infrared remote sensing and kirchhoff’s law: 1. laboratory measurements. In: *Journal of Geophysical Research*, Band 99(B6):S. 11,897–11,911, 1994.
- Salisbury, J.W. und Wald, A.E.: The role of volume scattering in reducing spectral contrast of reststrahlen bands in spectra of powdered minerals. In: *ICARUS*, Band 96:S. 121–128, 1992.
- Salisbury, J.W. und Walter, L.S.: Thermal infrared (2.5 – 13.5 μm) spectroscopic remotesensing of igneous rock types on particulate planetary surfaces. In: *Journal of Geophysical Research*, Band 94:S. 9192–9202, 1989.
- Salisbury, J.W., Walter, L.S., Vergo, N. und D’Aria, D.M.: *Infrared (2.1–25 μm) Spectra of Minerals*. The Johns Hopkins University Press., Baltimore, MD, 1991.
- Salvaggio, C. und Miller, C.J.: Comparison of field and laboratory collected midwave and long-wave infrared emissivity spectra / data reduction techniques. In: *Proceedings of the SPIE, Image Exploitation and Target Recognition, Algorithms and Technologies for Multispectral, Hyperspectral, and Ultraspectral Imagery VII*. Orlando, Florida, United States of America, 2001a, Band 4381, S. 549–558.

- Salvaggio, C. und Miller, C.J.: Methodologies and protocols for the collection of midwave and longwave infrared emissivity spectra using a portable field spectrometer. In: *Proceedings of the SPIE, Image Exploitation and Target Recognition, Algorithms and Technologies for Multispectral, Hyperspectral, and Ultraspectral Imagery VII*. Orlando, Florida, United States of America, 2001b, Band 4381, S. 539–548.
- Sanchez, P. A., Ahamed, S., Carré, F., Hartemink, A. E., Hempel, J., Huising, J., Lagacherie, P., A.B., McBratney, McKenzie, N. J., de Lourdes Mendonça-Santos, M. et al.: Digital soil map of the world. In: *Science*, Band 325(5941):S. 680–681, 2009.
- Schowengerdt, Robert A.: *Remote Sensing, Third Edition: Models and Methods for Image Processing*. Academic Press, Inc., Orlando, FL, USA, 2006.
- Schrumpf, M. und Trumbore, S.: Soil carbon storage: How the thin skin of the earth influences global biogeochemical cycles and climate. Technischer Bericht, Max-Planck-Gesellschaft, 2012.
- Shao, Y. und Leslie, L.M.: Wind erosion prediction over the australian continent. In: *Journal of Geophysical Research*, Band 102(D25):S. 30,091–30,10, 1997.
- Shao, Y., Leys, J. F., McTainsh, G.H. und Tews, K.: Numerical simulation of the october 2002 dust event in australia. In: *Journal of Geophysical Research*, Band 112(D08207), 2007. doi: 10.1029/2006JD007767.
- Smidt, E. und Meissl, K: The applicability of fourier transform infrared (ft-ir) spectroscopy in waste management. In: *Waste Management*, Band 27:S. 268—276, 2007.
- Solomon, D., Lehmann, J., Kinyangi, B.Q., J.and Liang und Schafer, T.: Carbon k-edge nexafs and ftir-atr spectroscopic investigation of organic carbon speciation in soils. In: *Soil Sci. Soc. Am. J.*, Band 69:S. 107–119, 2005.
- Spitzer, W.G. und Kleinmann, D. A.: Infrared lattice bands of quartz. In: *Phys. Rev.*, Band 121(5):S. 1324—1335, 1961.
- Stenberg, B. und Viscarra-Rossel, R. A.: *Diffuse Reflectance Spectroscopy for High-Resolution Soil Sensing*, Springer Netherlands, Band 1, S. 29–47. 2010. doi:10.1007/978-90-481-8859-8_3.
- Stevens, A., Udelhoven, T., Denis, A., Tychon, B., Liroy, R., Hoffmann, L. und van Wesemael, B.: Measuring soil organic carbon in croplands at regional scale using airborne imaging spectroscopy. In: *Geoderma*, Band 158:S. 32–45, 2010.
- Stoner, E.R. und Baumgardner, M.F.: Characteristic variations in reflectance of surface soils. In: *Soil Science Society of America Journal*, Band 45(6):S. 1161–1165, 1981.
- Tatzber, M., Stemmer, M., Spiegel, H., Katzlberger, C., Haberhauer, G., Mentler, A. und Gerzabek, M.H.: Ftir-spectroscopic characterization of humic acids and humin fractions obtained by advanced naoh, na4p2o7, and na2co3 extraction procedures. In: *J. Plant Nutr. Soil Sci.*, Band 170:S. 522—529, 2007.
- Tongway, D. J. und Hindley, N. L.: Landscape function analysis: Procedures for monitoring and assessing landscapes. Technischer Bericht, CSIRO Sustainable Ecosystems, Australia, 2004.
- UNCCD: Zero net land degradation - a sustainable development goal for rio+20. Unccd secretariat policy brief, United Nations Convention to Combat Desertification, Bonn, Germany, 2012.

- Vincent, R. K. und Hunt, G. R.: Infrared reflectance from mat surfaces. In: *Applied Optics*, Band 7(1):S. 53–58, 1968.
- Viscarra-Rossel, R. A., Walvoort, D.J.J., McBratney, A.B., Janik, L.J. und Skjemstad, J.O.: Visible, near infrared, mid infrared or combined diffuse reflectance spectroscopy for simultaneous assessment of various soil properties. In: *Geoderma*, Band 131:S. 59–75, 2006.
- Wald, A.E. und Salisbury, J.W.: Thermal infrared directional emissivity of powdered quartz. In: *Journal of Geophysical Research*, Band 100(B12):S. 24,665–24,675, 1995.
- Walkley, A. und Black, I.A.: An estimation of the degtjareff method for determining soil organic matter and a proposed modification of the chromic acid titration method. In: *Soil Science*, Band 37:S. 29–37, 1934.
- Wenrich, M. L. und Christensen, P. R.: Optical constants of minerals derived from emission spectroscopy: Application of quartz. In: *Journal of Geophysical Research*, Band 101(B7):S. 15921–15931, 1996.
- White, R.G.: *Handbook of industrial infrared analysis*. New York, Plenum Press, 1964.
- Whiting, M.L., Li, L. und Ustin, S.L.: Predicting water content using gaussian model on soil spectra. In: *Remote Sensing of Environment*, Band 89:S. 535–552, 2004.
- World Bank: Rising global interest in farmland. Technischer Bericht, The World Bank, Washington, DC, 2010.
- Young, S. J.: Inscene atmospheric compensation: Application to sebas data collected at the arm site. part 2 ATR-99(8407)-1, Aerosp. Corp., The El Segundo, Calif., Nov. 1998., 1998.
- Young, S. J., Johnson, B.R. und Hackwell, J.A: An in-scene method for atmospheric compensation of thermal hyperspectral data. In: *Journal of Geophysical Research*, Band 107(D24), 2002.
- Zimmermann, M., Leifeld, J. und Fuhrer, J.: Quantifying soil organic carbon fractions by infrared-spectroscopy. In: *Soil Biol. Biochem.*, Band 39:S. 224–231, 2007.

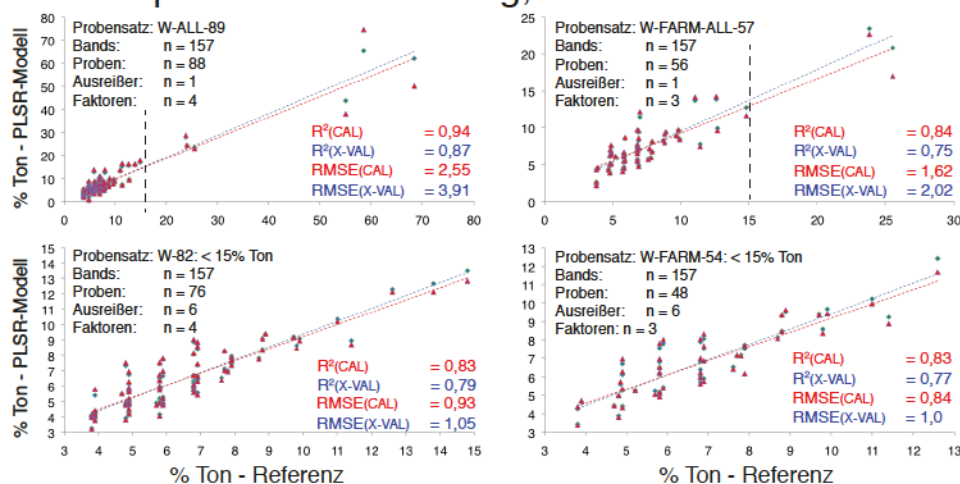
Anhang A: PLSR-Modelle zur Quantifizierung der Bodenparameter

μ FTIR: Voll-Auflösung, 7900 - 12236 nm



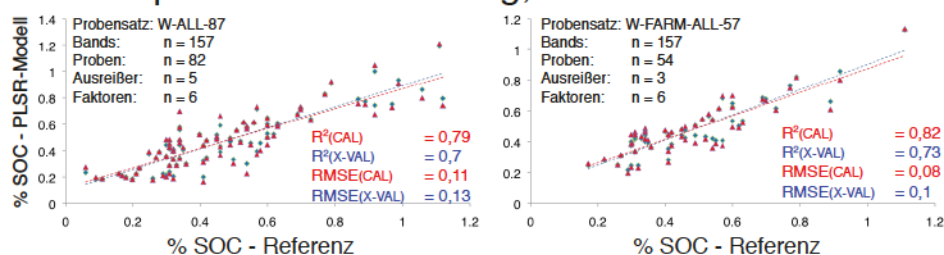
Sandgehalt: μ FTIR – Voll-Auflösung

μ FTIR: Voll-Auflösung, 7900 - 12236 nm



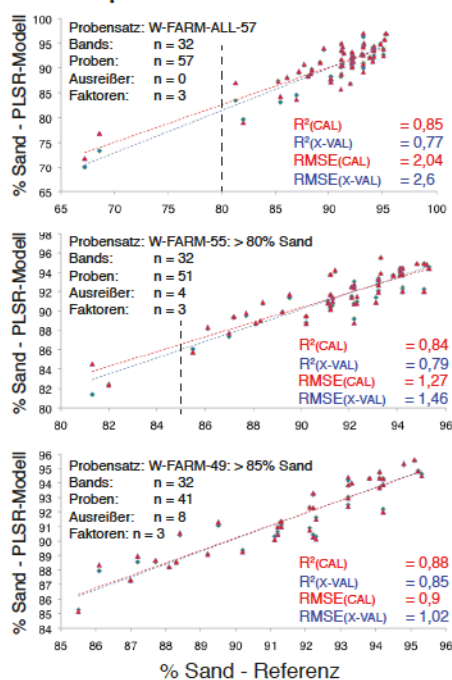
Tongehalt: μ FTIR – Voll-Auflösung

μ FTIR: Voll-Auflösung, 7900 - 12236 nm



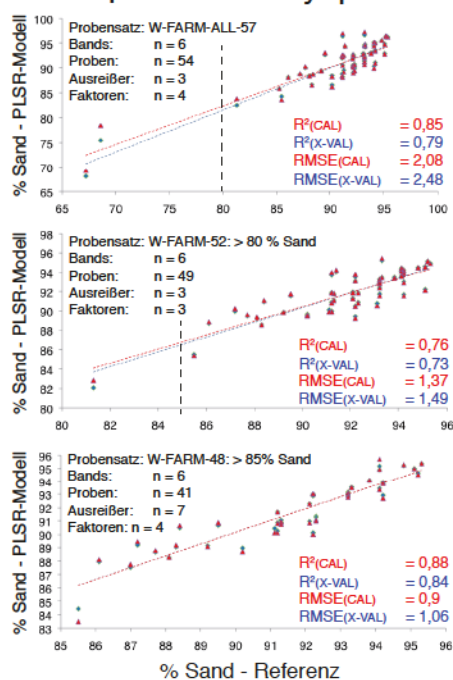
SOC-Gehalt: μ FTIR – Voll-Auflösung

μ FTIR res.TASI-600

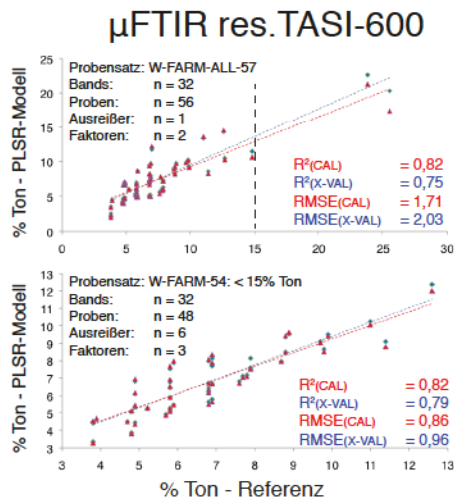


Sandgehalt: μ FTIR – res-TASI

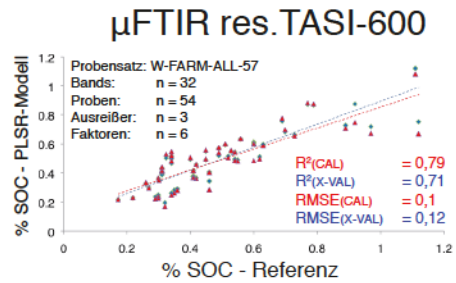
μ FTIR res.HyspIRI



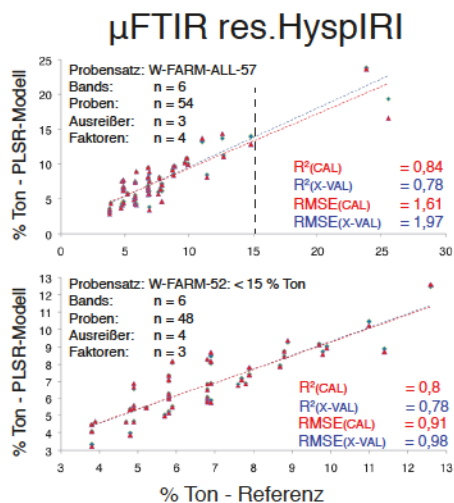
Sandgehalt: μ FTIR – res-HyspIRI



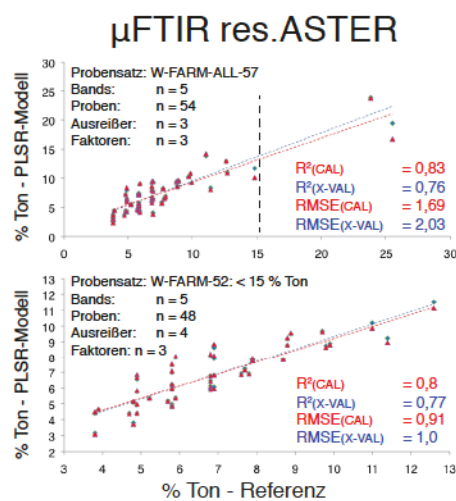
Tongehalt: μFTIR – res-TASI



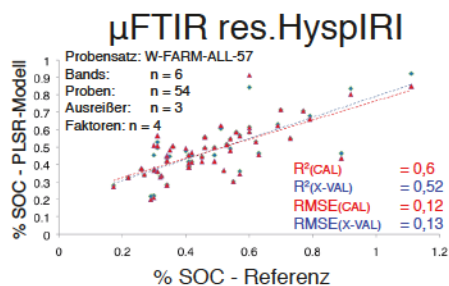
SOC-Gehalt: μFTIR – res-TASI



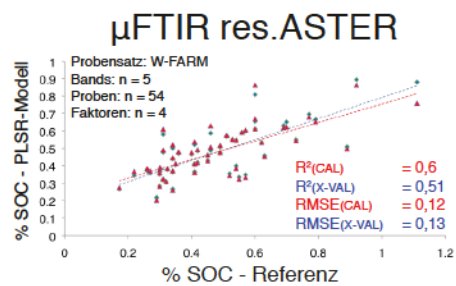
Tongehalt: μFTIR – res-HyspIRI



Tongehalt: μFTIR – res-ASTER

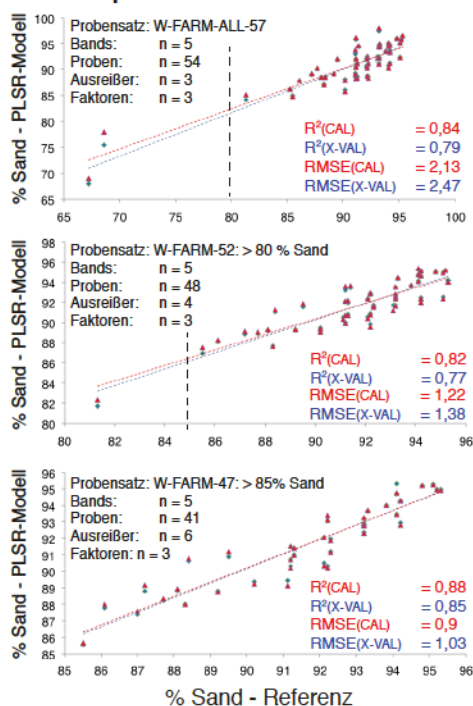


SOC-Gehalt: μFTIR – res-HyspIRI



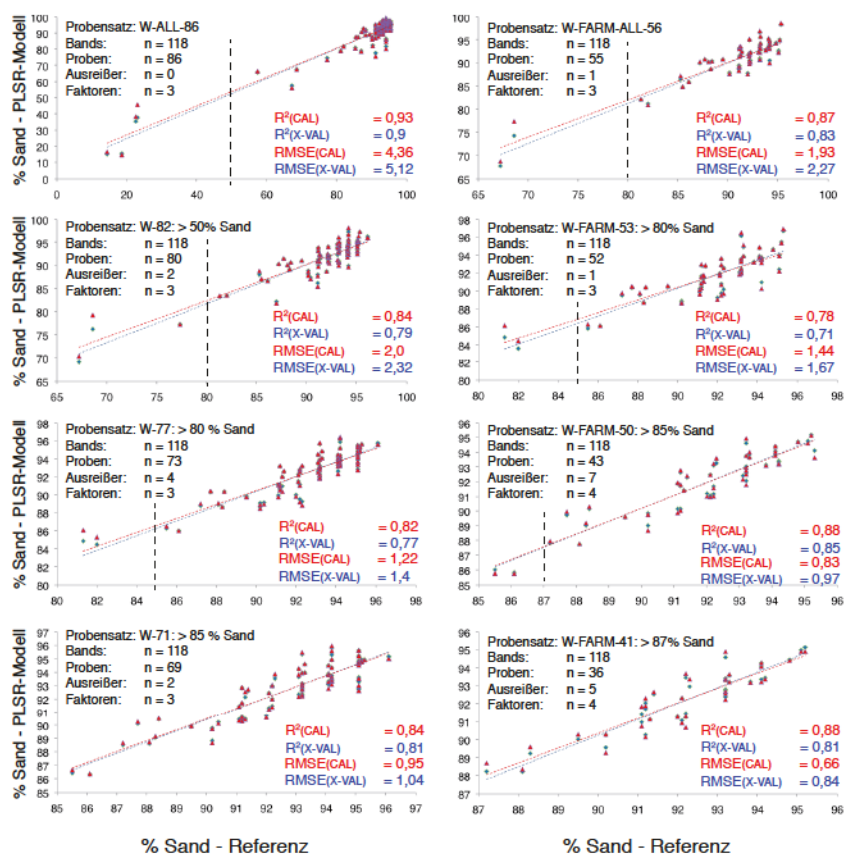
SOC-Gehalt: μFTIR – res-ASTER

μ FTIR res.ASTER



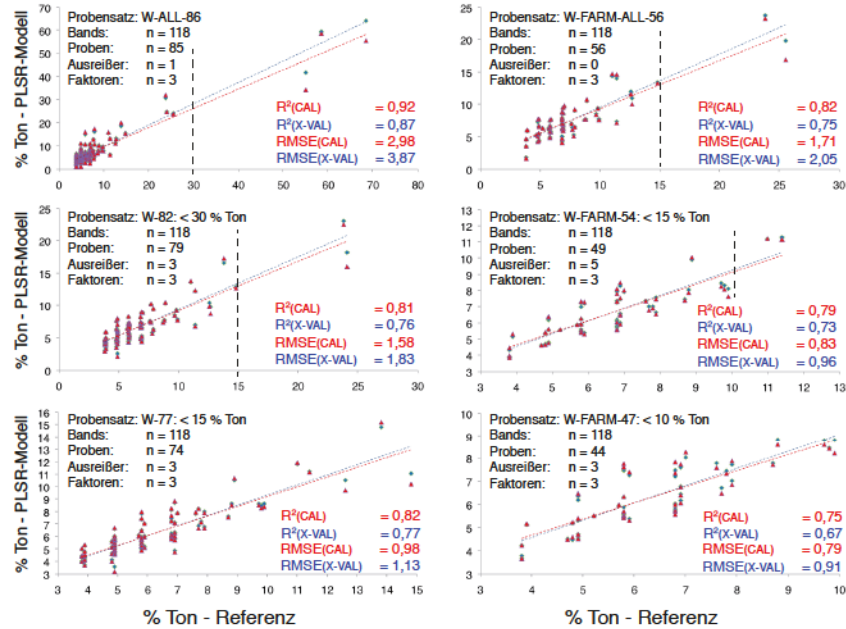
Sandgehalt: μ FTIR-res-ASTER

MIDAC: Voll-Auflösung, 7900 - 12288 nm



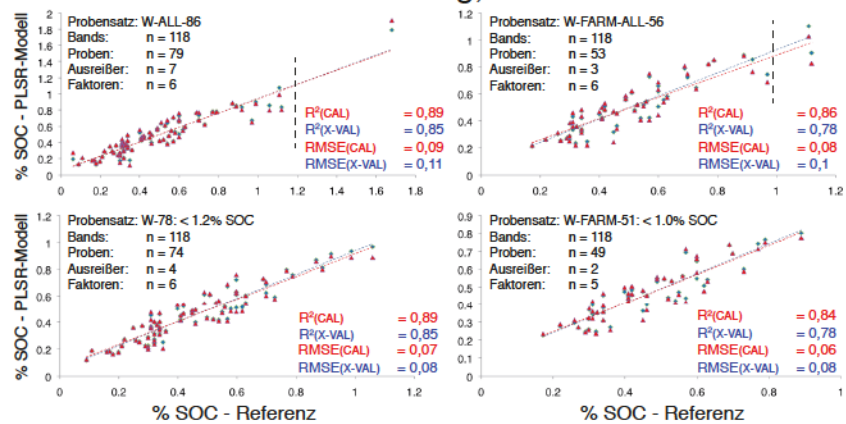
Sandgehalt: MIDAC – Voll-Auflösung

MIDAC: Voll-Auflösung, 7900 - 12288 nm

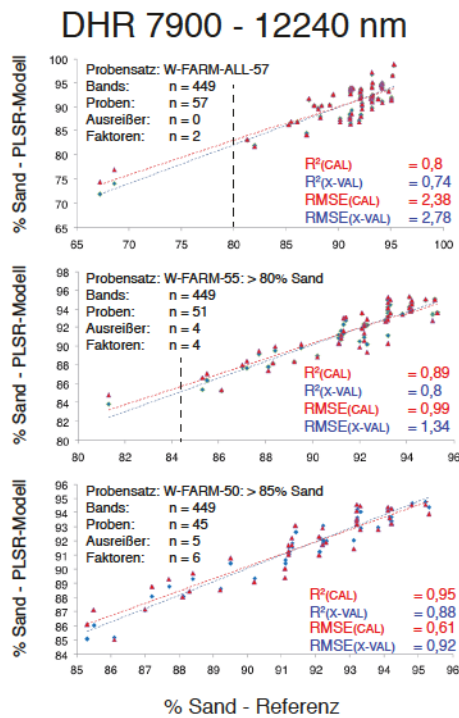


Tongehalt: MIDAC – Voll-Auflösung

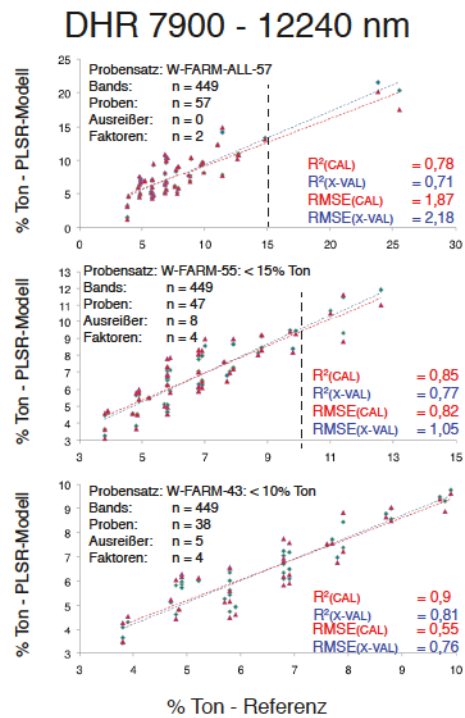
MIDAC: Voll-Auflösung, 7900 - 12288 nm



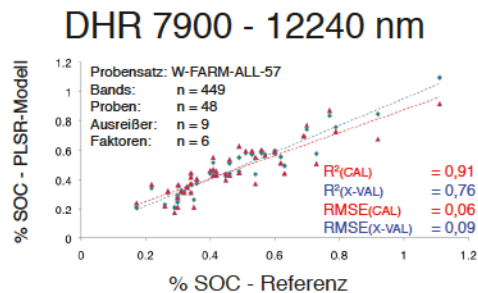
SOC-Gehalt: MIDAC – Voll-Auflösung



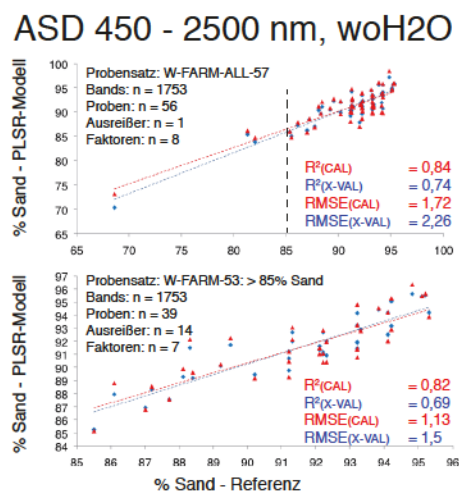
Sandgehalt: DHR – Voll-Auflösung



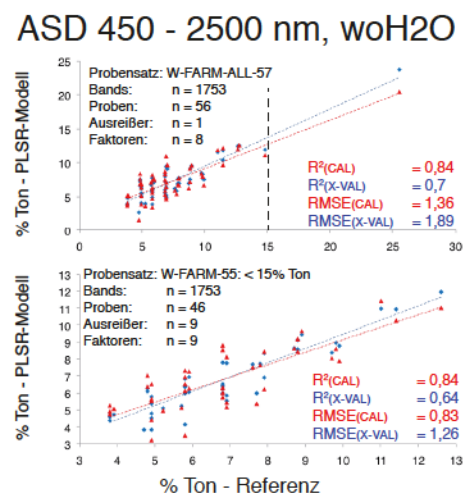
Tongehalt: DHR – Voll-Auflösung



SOC-Gehalt: DHR – Voll-Auflösung

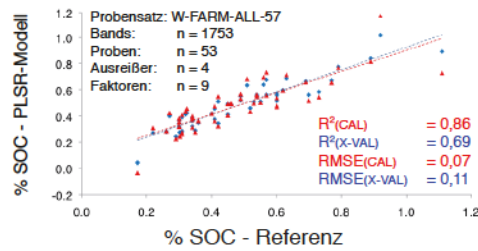


Sandgehalt: ASD – Voll-Auflösung



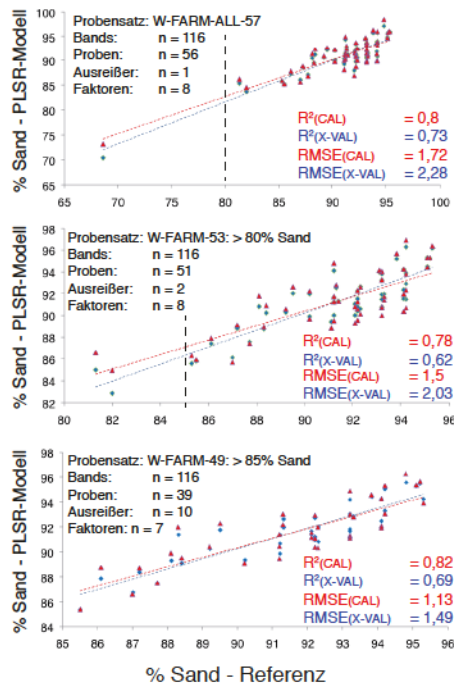
Tongehalt: ASD – Voll-Auflösung

ASD 450 - 2500 nm, woH2O



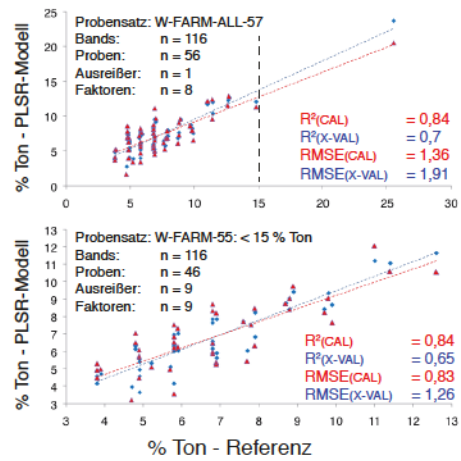
SOC-Gehalt: ASD – Voll-Auflösung

ASD resHyMap, woH2O



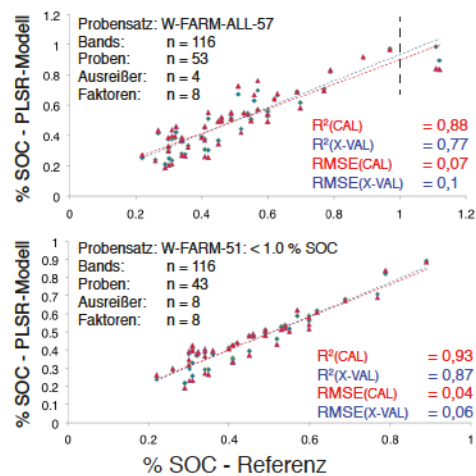
Sandgehalt: ASD – resHyMAP

ASD resHyMap, woH2O



Tongehalt: ASD – resHyMAP

ASD resHyMap, woH2O



SOC-Gehalt: ASD – resHyMAP

Anhang B: PLSR-Modelle zum Geo-Chemismus (XRF-Analyse)

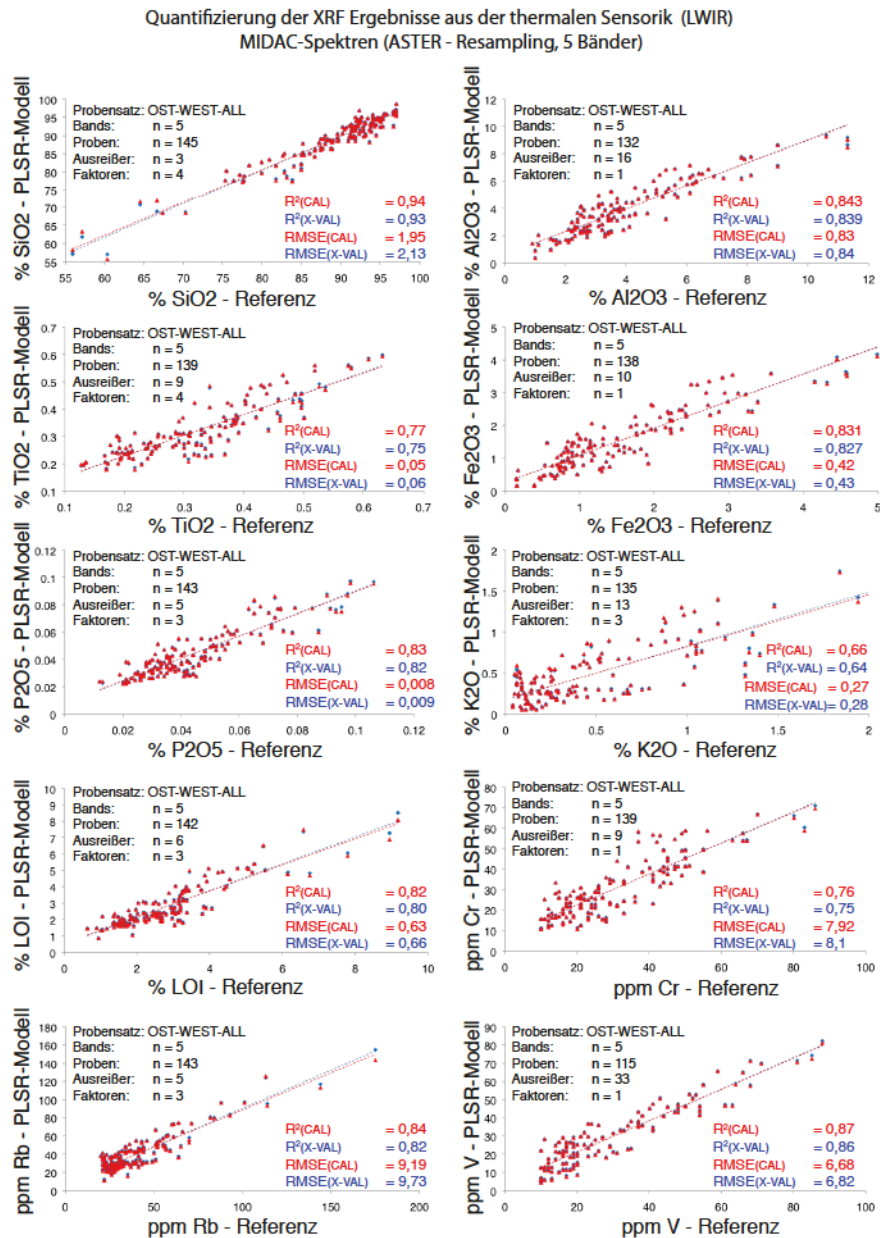


Abbildung B.1: Vorhersagemodelle der Elemente/Oxide (bestimmt in der XRF-Analyse), für die eine Quantifizierung auf Grundlage der fünf ASTER-Bänder realisiert werden konnte (MIDAC-Spektren).

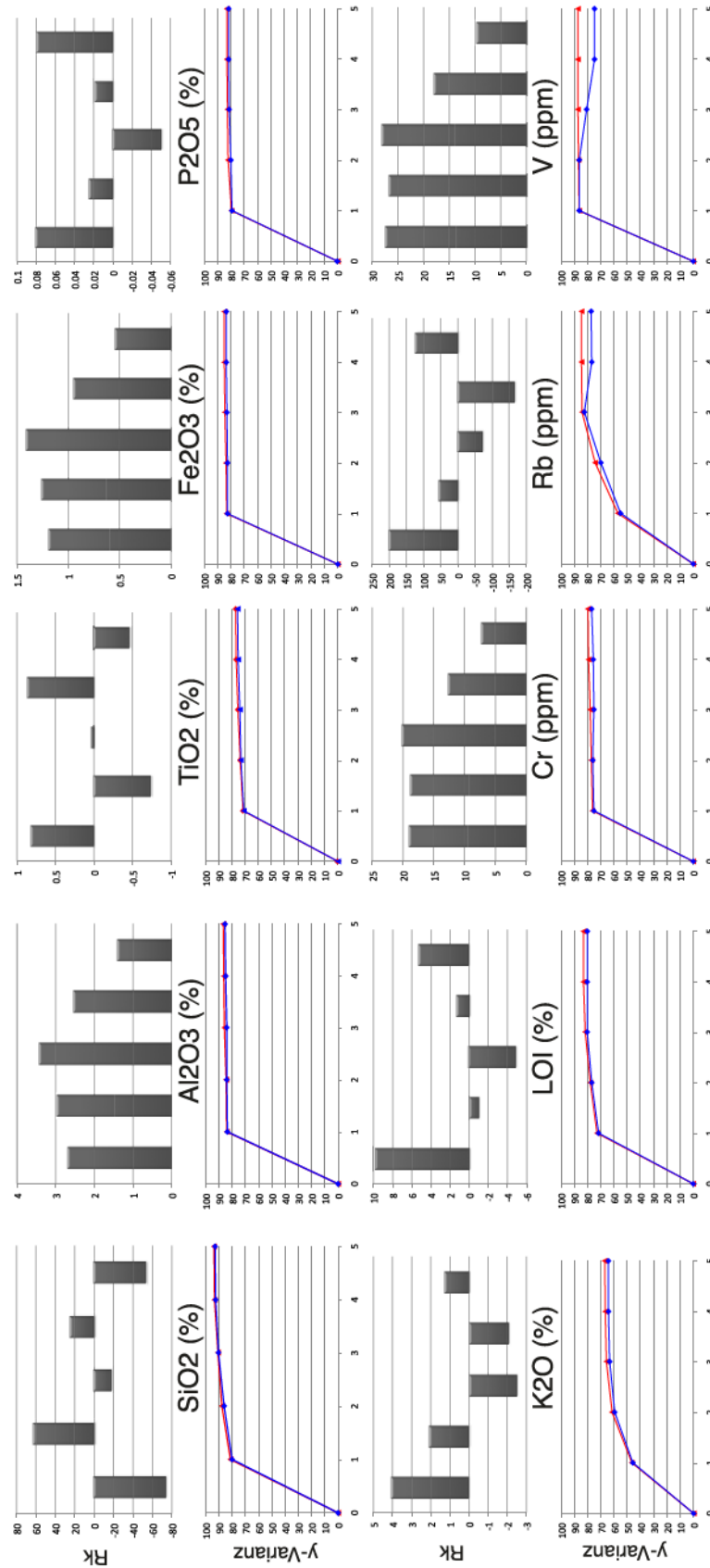


Abbildung B.2: PLSR-Ergebnisse zu Abb. B.1: Entwicklung der erklärten y-Varianzen über die Faktorenzahl und Regressionskoeffizienten (R_k) zu den ASTER-Bändern B1 bis B5.

Anhang C: Analytik – Bodenparameter und Geo-Chemie (XRF)

Parameter	Daten-satz	Proben-satz	n	Mean	SD	Max	Min	Median	Q1	Q3
Sand-gehalt (%)	WEST	ALL	89	88.44	14.69	95.30	14.30	92.70	90.25	94.20
	W-FARM	ALL	57	90.52	5.36	95.30	67.20	92.10	89.50	93.30
		VPS: >85 %	41	91.67	2.65	95.30	85.50	92.20	90.20	93.82
Ton-gehalt (%)	WEST	ALL	89	9.09	10.71	68.40	3.80	5.90	4.90	7.90
	W-FARM	ALL	57	7.68	4.05	25.50	3.80	6.80	5.70	8.70
		VPS: <15 %	48	6.76	2.06	12.60	3.80	6.80	5.14	7.83
SOC-Gehalt (%)	WEST	ALL	87	0.46	0.25	1.12	0.06	0.42	0.31	0.60
	W-FARM	ALL	57	0.51	0.22	1.12	0.17	0.46	0.34	0.60
		VPS	54	0.48	0.19	1.11	0.17	0.45	0.33	0.57
SiO ₂ (%)	OST-WEST	ALL	148	89.038	7.312	97	55.9	91.6	86.825	93.675
TiO ₂ (%)			148	0.340	0.134	0.976	0.127	0.328	0.238	0.404
Al ₂ O ₃ (%)			148	4.662	3.092	25	0.9	3.7	2.6	6.1
Fe ₂ O ₃ (%)			148	1.681	1.164	6.09	0.13	1.31	0.84	2.228
MnO (%)			148	0.035	0.078	0.653	0.01	0.019	0.012	0.03
MgO (%)			148	0.167	0.385	2.51	0.02	0.05	0.04	0.088
CaO (%)			148	0.266	0.852	8.99	0.02	0.08	0.053	0.148
Na ₂ O (%)			148	0.443	0.605	2.61	0.01	0.14	0.07	0.62
K ₂ O (%)			148	0.584	0.602	3.65	0.04	0.38	0.16	0.86
P ₂ O ₅ (%)			148	0.046	0.021	0.15	0.012	0.04	0.031	0.055
LOI (%)			148	2.969	1.774	14.01	0.63	2.645	1.77	3.358
Ba (ppm)			148	197.027	184.536	1379	17	139	69.25	272.5
Cr (ppm)			148	30.791	15.984	86	10	26	18	43
Ga (ppm)			148	13.174	4.448	30	10	11	11	14.5
Nb (ppm)			148	11.167	1.935	19	10	10	10	11.25
Ni (ppm)			148	15.553	5.646	37	10	15	11	17
Rb (ppm)			148	42.068	23.591	175	20	34.5	27.25	50.75
Sr (ppm)			148	34.417	47.533	528	10	21.5	16	37
V (ppm)			148	32.412	21.255	133	10	27	17	41
Y (ppm)			148	22.200	5.357	30	17	21	18	25
Zn (ppm)			148	25.257	29.423	210	10	16	12	28
Zr (ppm)			148	348.452	143.027	912	99	334	265	409.5

Tabelle C.1: Beschreibende Statistik der Boden- und XRF-Parameter der jeweiligen Daten-/Probensätze (VPS: Vergleichs-Probensatz): Probenzahl (n), Mittelwert (Mean), Standardabweichung (SD), Maximum, Minimum, Median, 25%-Quartil (Q1) und 75%-Quartil (Q3).

Danksagung

Mein besonderer Dank gilt Prof. Dr. Hermann Kaufmann, der mir die Möglichkeit gab, diese Dissertation am Deutschen GeoForschungsZentrum Potsdam in der Sektion Fernerkundung anzufertigen. Er bot mir zudem die Gelegenheit an zahlreichen Feldkampagnen und Konferenzen teilzunehmen und ebnete mir darüber hinaus den Weg für die wissenschaftliche Zusammenarbeit mit nationalen und internationalen Forschungseinrichtungen. Des Weiteren danke ich ihm für die Begutachtung der Arbeit. Ebenso danke ich Prof. Dr. Patrick Hostert von der Humboldt-Universität zu Berlin sehr herzlich für die Übernahme des Erstgutachtens. Prof. Dr. Thomas Udelhoven von der Universität Trier möchte ich zum einen dafür danken, dass er das Drittgutachten der Dissertation übernommen hat. Zum anderen spreche ich ihm meinen herzlichen Dank für die Organisation des eindrucksvollen Workshops zur thermalen hyperspektralen Fernerkundung am Gabriel Lippmann Zentrum aus. Der Workshop hat mich zum Ende meiner Dissertation noch einmal neu motiviert und mir die Möglichkeiten vieler spannender Anwendungsgebiete vor Augen geführt, die sich aus meiner Grundlagenforschung im Labor ergeben können.

Unverzichtbar für das Gelingen dieser Arbeit war die Unterstützung meiner Betreuerin Dr. Sabine Chabrilat, die mir in fachlichen Fragen als Mentorin mit Rat und Tat zur Seite stand.

Besonders erwähnen möchte ich darüber hinaus meine treuen und unermüdlichen Australischen Kollegen vom CSIRO und vom DAFWA in Perth. Allen voran möchte ich Dr. Ian Lau danken, der nicht nur in den trockenen und heißen Wochen der Beprobung auf den Feldern Mullewas tatkräftig zu meiner Seite stand. Ian unterstützte mich zudem während meiner ganzen Dissertationszeit mit seinem großen Engagement und mit seinem theoretischen und praktischen Fachwissen. Dr. Thomas Cudahy und Dr. Cindy Ong danke ich für die fruchtbare Kooperation mit dem CSIRO in Perth und für die vielen anregenden Diskussionen, die daraus entstanden. Bei Dr. Dan Carter and Buddy Wheaton und dem gesamten DAFWA-Team möchte ich mich ganz herzlich für ihre Hilfe bei der Verwirklichung der Feldbegehungen danken sowie ihren Bemühungen mir während der stundenlangen Fahrten über die ausgetrockneten Weizenfelder Mullewas den Australischen Kauderwelsch näher zu bringen. Außerdem danke ich Andrew Hacket für die großartige Zeit, die wir unter der heißen Australischen Sonne während der Feldkampagnen hatten und für die feuchtfröhlichen Stunden der Abkühlung danach.

Dr. Peter Hausknecht und seiner Familie danke ich für die berauschende Herberge während meiner vielen Aufenthalte in Perth.

Auch Dr. Robert Hewson möchte ich einen ganz besonderen Dank aussprechen. Er hat mir die Methoden der thermalen Spektroskopie erst schmackhaft gemacht und mich während meiner Dissertationszeit stets mit seinem wissenschaftlichen Sachverstand begleitet. *Rob, I hope your Käsespätzle has improved.* Ebenso möchte ich mich bei Dr. Chris Hecker vom ITC in Enschede bedanken, der mich ebenfalls als Mentor in allen Fragen zur thermalen Spektroskopie unterstützte und zudem den zweitägigen MIDAC-Mess-Marathon mit mir durchstand.

Für die Hilfe bei der Bodenaufbereitung und den Laboranalysen am GFZ und an der Universität Potsdam danke ich sehr herzlich Dr. Rudolf Naumann, Andrea Gottsche, Petra Meier, Dr. Heide Kraudelt, Felix Eckelmann und Sabrina Herrmann.

Ein großes Dankeschön gebührt den Korrekturlesern, Christiane Scheidt für die Rechtschreib- und Grammatikkontrolle und Dr. Karl Segl für die inhaltliche Kontrolle. Karl steht zudem noch ein herzliches *Merci* für das großartige *Radl* zu, das mich in den letzten Monaten meiner Promotionszeit jeden Tag verlässlich in die Stabi brachte. Außerdem danke ich allen GFZ-Kollegen der Sektion Fernerkundung für die wunderbare Zeit auf dem Telegrafenberg in Potsdam – ganz besonders der Keller-Truppe für die heiteren mittäglichen Kaffeepausen.

Nicht genug danken kann ich meinen Eltern für ihre Unterstützung und Förderung. Sie haben mir auf meinem Weg stets vertraut.

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass die von mir eingereichte Dissertation zum Thema

„Möglichkeiten der Nutzung thermal-infraroter Wellenlängen zur fernerkundlichen Erfassung/Quantifizierung von Bodenparametern in semiariden Agrarregionen – eine vergleichende Studie der spektralen Bereiche des LWIR und des VNIR-SWIR auf der Basis von Labormessungen“

selbständig und ohne unerlaubte Hilfe angefertigt habe. Ich habe die Dissertation an keiner anderen Universität eingereicht und besitze keinen Doktorgrad im oben genannten Fach.

Berlin, den 23. September 2013

Andreas Eisele